



Titre: Version adaptative d'un modèle à vitesse discrète pour l'équation de Boltzmann
Title:

Auteur: Kondo Claude Assi
Author:

Date: 2008

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Assi, K. C. (2008). Version adaptative d'un modèle à vitesse discrète pour l'équation de Boltzmann [Master's thesis, École Polytechnique de Montréal].
Citation: PolyPublie. <https://publications.polymtl.ca/8315/>

 **Document en libre accès dans PolyPublie**
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/8315/>
PolyPublie URL:

**Directeurs de
recherche:**
Advisors:

Programme: Unspecified
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

VERSION ADAPTATIVE D'UN MODÈLE À VÉLOCITÉ DISCRÈTE POUR
L'ÉQUATION DE BOLTZMANN

KONDO CLAUDE ASSI
DÉPARTEMENT DE MATHÉMATIQUES ET DE GÉNIE INDUSTRIEL
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(MATHÉMATIQUES APPLIQUÉES)

MAI 2008



Library and
Archives Canada

Bibliothèque et
Archives Canada

Published Heritage
Branch

Direction du
Patrimoine de l'édition

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence

ISBN: 978-0-494-46030-6

Our file Notre référence

ISBN: 978-0-494-46030-6

NOTICE:

The author has granted a non-exclusive license allowing Library and Archives Canada to reproduce, publish, archive, preserve, conserve, communicate to the public by telecommunication or on the Internet, loan, distribute and sell theses worldwide, for commercial or non-commercial purposes, in microform, paper, electronic and/or any other formats.

The author retains copyright ownership and moral rights in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

AVIS:

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque et Archives Canada de reproduire, publier, archiver, sauvegarder, conserver, transmettre au public par télécommunication ou par l'Internet, prêter, distribuer et vendre des thèses partout dans le monde, à des fins commerciales ou autres, sur support microforme, papier, électronique et/ou autres formats.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protègent cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms may have been removed from this thesis.

Conformément à la loi canadienne sur la protection de la vie privée, quelques formulaires secondaires ont été enlevés de cette thèse.

While these forms may be included in the document page count, their removal does not represent any loss of content from the thesis.

Bien que ces formulaires aient inclus dans la pagination, il n'y aura aucun contenu manquant.

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé :

VERSION ADAPTATIVE D'UN MODÈLE À VÉLOCITÉ DISCRÈTE POUR
L'ÉQUATION DE BOLTZMANN

présenté par : ASSI Kondo Claude

en vue de l'obtention du diplôme de : Maîtrise ès sciences appliquées

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

M. SAUCIER Antoine, Ph.D., président

M. LAFOREST Marc, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. BERTRAND François, Ph.D., membre

Louanges à Dieu, Le Tout Miséricordieux, Le Très Miséricordieux.

À Lui, je témoigne reconnaissance.

REMERCIEMENTS

Les travaux présentés dans ce mémoire ont été effectués sous la direction du Dr. Marc Laforest, qui m'a fait bénéficier, entre autres, de son expérience, de ses suggestions et de ses conseils. Je tiens à lui exprimer mes remerciements. Travailler avec Marc fut pour moi un plaisir et un enrichissement intellectuel. Je remercie tous mes amis pour leur soutien direct ou indirect. Je remercie également l'administration de l'École Polytechnique de Montréal et le département MAGI, pour les conditions favorables qui ont permis la réalisation de ce travail. Je remercie le CRSNG et la Fondation Canadienne pour l'Innovation pour tout leur support financier.

RÉSUMÉ

Nous proposons, dans ce mémoire, un estimateur d'erreur a posteriori pour les modèles à vitesse discrète (MVD) pour l'équation de Boltzmann, élément central pour la construction d'algorithmes adaptatifs. Par une généralisation de l'étude de L^1 -stabilité de MVD effectuée par Ha et Tzavaras, nous avons établi un estimateur d'erreur a posteriori et en avons formulé une preuve mathématique rigoureuse. Nous proposons une version adaptative de l'algorithme d'Illner et Rjasanow pour l'équation de Boltzmann. Des résultats numériques qui confirment l'efficacité de l'estimateur d'erreur sont également présentés. Ce travail est limité au cas 1-D. Notre approche est originale et pourrait, sous certaines conditions, être généralisée aux modèles multi-dimensionnels.

ABSTRACT

We propose, in this thesis, an a posteriori error estimator for discrete velocity models (DVM) approximation of the Boltzmann equation, a key element for the formulation of adaptive algorithms. In generalizing Ha and Tzavaras L^1 -stability analysis for Discrete Velocity Boltzmann equations, we have formulated an a posteriori error estimator and have made a rigorous mathematical proof. We present an adaptive version of the Illner-Rjasanow algorithm for the Boltzmann equation. Numerical results which confirm the efficiency of the error estimator are also presented. This work is limited to the 1-D case. Our approach is original, and could, under certain conditions, be generalized to multi-dimensional models.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iv
REMERCIEMENTS	v
RÉSUMÉ	vi
ABSTRACT	vii
TABLE DES MATIÈRES	viii
LISTE DES FIGURES	xi
LISTE DES NOTATIONS ET DES SYMBOLES	xii
LISTE DES ANNEXES	xiii
INTRODUCTION	1
CHAPITRE 1 ÉQUATION DE BOLTZMANN	2
1.1 Gaz raréfiés : Applications	2
1.2 Modèle de gaz raréfié	4
1.3 Le noyau de collision	7
1.3.1 Généralités	7
1.3.2 Exemples de noyaux de collision	8
1.4 Propriétés	10
1.5 Conditions initiales et aux frontières	13
1.6 Existence de solution	14
1.7 Connexion microscopique-macroscopique	16
1.7.1 Grandeurs physiques	16

1.7.2	Équations de conservation	17
1.8	Méthodes numériques usuelles	19
CHAPITRE 2	MODÈLES À VÉLOCITÉ DISCRÈTE	24
2.1	Théorie cinétique discrète générale	24
2.1.1	Un exemple simple : modèle 3D de Broadwell	27
2.1.2	Autres exemples	28
2.1.3	Propriétés héritées de l'équation de Boltzmann	30
2.1.4	Solution faible et existence	34
2.2	L'algorithme de Illner-Rjasanow	36
2.2.1	Initialisation <code>distribution.init()</code>	42
2.2.2	La méthode <code>collision_operateur()</code>	43
2.2.2.1	Vecteurs vitesses post-collisionnelles	44
2.2.2.2	Densités post-collisionnelles	45
2.2.3	La méthode <code>reduction()</code>	47
2.3	Schéma pour le problème non-homogène	49
2.3.1	Discrétisation de l'espace de phase	50
2.3.2	Méthode de <i>Splitting</i> d'opérateur	51
2.3.2.1	Splitting de l'opérateur de transport \mathcal{T}	52
2.3.2.2	Opérateur de collision \mathcal{C}	54
2.3.2.3	Conditions initiales et aux frontières	54
2.4	Adaptivité	54
2.4.1	Raffinement et Déraffinement	55
2.4.2	Algorithmes	55
2.4.3	Collision-Adaptation	57
CHAPITRE 3	ESTIMATION D'ERREUR A POSTERIORI DANS L^1 ENTRE DEUX MODÈLES À VÉLOCITÉ DISCRÈTE	59
3.1	Formulation du problème	59

3.2	Stabilité, estimation d'erreurs et fonctionnelles	61
3.2.1	Preuve de Théorème 3.2.3	76
3.3	Réalisabilité de modèles compatibles	81
CHAPITRE 4	RÉSULTATS NUMÉRIQUES	85
4.1	Projection de modèles MVD	86
4.2	Expériences numériques	89
4.3	Analyse des résultats	91
CONCLUSION	93
RÉFÉRENCES	95
ANNEXES	101

LISTE DES FIGURES

FIGURE 1.1	Géométrie de collision de sphères dures.	7
FIGURE 1.2	Potentiel de Lennard-Jones.	9
FIGURE 2.1	Modèle à 6-vitesses de Broadwell.	28
FIGURE 2.2	Modèle coplanaire à 8-vitesses.	29
FIGURE 4.1	(a)Modèle grossier et (b)Modèle fin.	87
FIGURE 4.2	Projection 1D des modèles grossier et fin dans la direction $\mathbf{D} =$ (1,1) : nomenclature de correspondance de vitesses.	89
FIGURE 4.3	Graphes η en fonction du temps, pour $\lambda = 0.125$ fixe, et à différentes valeurs de masse densité totale, $A_0 =$ (a) 1.0, (b) 0.1, (c) $10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4}$	92
FIGURE 4.4	Graphes η en fonction du temps, pour $A_0 = 0.01$ fixe, et à différentes valeurs de $\lambda =$ (a) 1.0, (b) 0.5, (c) 0.25, (d) 0.125, (e) 0.0125, 0.00125.	92

LISTE DES NOTATIONS ET DES SYMBOLES

$L^1 :$	$\ u\ _{L^1} = \int_{\Omega} u(x) dx < \infty$	page 1
$\Omega :$	Domaine d'espace physique	page 2
$\mathbf{x} :$	Position dans l'espace physique	page 2
$t :$	Temps	page 2
$f :$	Fonction de densité	page 2
$\mathbf{u} :$	Vecteur vitesse	page 2
$Q(.,.) :$	Opérateur de collision	page 4
$B(.,.,.) :$	Noyau de collision	page 4
$\mathbf{e} :$	vecteur unitaire	page 4
$\mathbb{S}^{d-1} :$	Sphère unité en dimension d	page 4
$\sigma :$	Section efficace différentielle	page 7
$H(t) :$	Fonctionnelle H de Boltzmann	page 12
$f_i :$	Fonction de densité pour vitesse \mathbf{v}_i	page 25
$Q_i(\mathbf{f}, \mathbf{f}) :$	Opérateur de collision dans modèle à vitesse discrète	page 25
$A_{ij}^{kl} :$	Coefficient de collision binaire	page 25
$p_{ij}^{kl} :$	Probabilité de transition pour une collision binaire	page 26

LISTE DES ANNEXES

ANNEXE I	PREUVE DE LEMME	101
1.1	Preuve du Lemme 3.2.5	101

INTRODUCTION

Ce mémoire contient la première construction mathématique rigoureuse d'un estimateur d'erreur a posteriori pour les modèles à vitesse discrète (MVD), en vue de l'implémentation d'un algorithme adaptatif du modèle de Illner et Rjasanow. Le résultat est limité à la projection 1D de modèles 3D, et constitue l'élément de base pour la formulation et l'implémentation de versions adaptatives de MVD. Ce résultat est basé sur une généralisation de l'étude de la L^1 -stabilité des MVD en 1-D par Ha et Tzavaras. Cette étude utilise une fonctionnelle non linéaire d'interaction que nous étendons au contexte de deux modèles différents.

Ce mémoire est constituée de quatre chapitres. Le premier chapitre contient une introduction à la théorie cinétique de Boltzmann (l'équation de Boltzmann et ses propriétés). La Section 1.8 contient un bref descriptif des méthodes d'approximation numériques usuelles pour l'équation de Boltzmann. Le second chapitre décrit les généralités concernant les modèles à vitesse discrète pour l'équation de Boltzmann. Nous y présentons en particulier l'algorithme de Illner-Rjasanow dans le cas homogène en espace. Nous proposons à la dernière section du chapitre 2, une version adaptative de l'algorithme Illner-Rjasanow pour le problème général non homogène en espace. Le troisième chapitre établit et démontre un estimateur d'erreur a posteriori pour les modèles à vitesse discrète. Notre résultat principal pour l'estimation d'erreur est énoncé dans le Corollaire 3.2.4. Dans le quatrième chapitre, on présente des résultats numériques validant l'efficacité de l'estimateur d'erreur. Bien que nous ayons proposé une version adaptative de l'algorithme d'Illner et Rjasanow, nous ne présentons pas de résultats numériques sur ce sujet.

CHAPITRE 1

ÉQUATION DE BOLTZMANN

L'objectif de ce chapitre est de familiariser le lecteur avec l'analyse de l'équation de Boltzmann. Les modèles à vitesse discrètes qui sont une approximation de l'équation de Boltzmann seront traités en détail dans le Chapitre 2, après la mise en contexte du Chapitre 1.

1.1 Gaz raréfiés : Applications

Dans un domaine fermé Ω de l'espace contenant un gaz, les molécules du gaz sont dispersées et entrent occasionnellement en collision les unes avec les autres. Quand les variations de température, pression et densité du gaz sont petites, par rapport à l'échelle de temps entre les collisions dans le gaz, alors le gaz atteint très rapidement un équilibre thermodynamique local. Il est bien connu en mécanique statistique que cet équilibre thermodynamique local, i.e dans un voisinage d'un point $\mathbf{x} \in \Omega$ au temps t , implique que la distribution f qui définit la probabilité

$$\mathbb{P}\{\text{particule en } (\mathbf{x}, t) \text{ à vitesse } \mathbf{u} \in V\} = \frac{\int_V f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) d\mathbf{u}}{\int_{\mathbb{R}^3} f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) d\mathbf{u}}, \quad (1.1)$$

est une distribution maxwellienne

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) = \frac{\rho(\mathbf{x}, t)}{(2\pi RT)^{d/2}} \exp\left(-\frac{|\mathbf{u} - \bar{\mathbf{u}}|^2}{2RT}\right),$$

où R^1 est une constante (appelée la constante du gaz), d la dimension de l'espace. Cette distribution est donc entièrement déterminée par la valeur moyenne $\bar{u}(\mathbf{x}, t)$ des vitesses, la température $T = T(\mathbf{x}, t)$ et la densité ρ au point (\mathbf{x}, t) . Sous ces hypothèses physiques, il est possible d'écrire des équations aux dérivées partielles qui décrivent l'évolution temporelle et spatiale de ces moyennes.

Dans certaines situations physiques, l'hypothèse que les variations de températures, pression et densité du gaz soient très lentes par rapport à l'échelle de temps entre les collisions n'est pas satisfaite et les distributions de probabilité des vitesses ne sont pas maxwelliennes. Le paramètre caractéristique qui détermine les propriétés d'écoulement de gaz est le nombre de Knudsen, $Kn = \frac{\tau}{L}$ où τ est le libre parcours moyen dans le gaz et L l'échelle de longueur de référence de l'écoulement. Les effets de l'invalidité de l'approximation de milieu continu se font remarquer lorsque $Kn \sim 0.1$ ou même moins. Bien qu'il n'existe aucune frontière nette partageant les régions de nombre de Knudsen, il est généralement admis que les écoulements avec nombre de Knudsen inférieur à 0.01 sont considérés des écoulements en milieu continu. Il est aussi généralement admis que le régime d'écoulement de molécules libres est supposé pour les nombres de Knudsen supérieurs à 10. La région de nombre de Knudsen entre 0.01 et 10 est connu comme le régime transitionnel où ni l'hypothèse de milieu continu, ni l'hypothèse de molécule libre ne sont appropriés. Pour un tel régime, on a nécessairement recours à la théorie cinétique, qui consiste à modéliser la fonction de distribution de vitesses. Les applications de haute performance où l'on pourrait nécessiter une modélisation de la distribution des vitesses des particules comprend à la fois des applications en aérodynamique : rentrée atmosphérique d'une navette spatiale, les moteurs *Ramjet* et *Scramjet*, les moteurs spatiaux à ions ainsi que des applications industrielles : modélisation des interfaces de changement de phases, modélisation des bouilloires dans les raffineries, modélisation des plasmas, et même en astronomie (si on tient compte des équations de Vlasov) : vents

¹ $R = 287.05 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ pour l'air sec.

solaires, nébuleuses, étoiles, etc.

1.2 Modèle de gaz raréfié

Pour des molécules symétriques (gaz monoatomiques), la mécanique statistique permet d'établir que la fonction distribution $f = f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ pour un gaz raréfié obéit à l'équation de Boltzmann

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f = Q(f, f)(\mathbf{u}), \quad (1.2)$$

où $\mathbf{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^d$ ($d = 1, 2$ ou 3) est la variable de position dans le domaine Ω de l'espace physique, $t \in \mathbb{R}^+$ est la variable de temps, $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^d$ est la vitesse et l'opérateur de collision $Q(f, f)(\mathbf{u})$ est donné par

$$Q(f, f)(\mathbf{u}) = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{S}^{d-1}} B(\mathbf{u}, \mathbf{w}, \mathbf{e}) (f(\mathbf{u}') f(\mathbf{w}') - f(\mathbf{u}) f(\mathbf{w})) d\mathbf{e} d\mathbf{w}. \quad (1.3)$$

Dans le cas où le gaz ne contient que des particules identiques, les vecteurs $\mathbf{u}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^d$ désignent les vitesses pré-collisionnelles, et $\mathbf{u}', \mathbf{w}' \in \mathbb{R}^d$ sont les vitesses post-collisionnelles,

$$\mathbf{u}' = \frac{1}{2}(\mathbf{u} + \mathbf{w} + |\xi| \mathbf{e}), \quad (1.4)$$

$$\mathbf{w}' = \frac{1}{2}(\mathbf{u} + \mathbf{w} - |\xi| \mathbf{e}), \quad (1.5)$$

entièrement déterminé par $\xi = \mathbf{u} - \mathbf{w}$ et un vecteur unitaire $\mathbf{e} \in \mathbb{S}^{d-1} \subset \mathbb{R}^d$. Il est facile de vérifier que toute collision entre deux particules identiques de vitesses \mathbf{u}, \mathbf{w} , qui satisfait la conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie, doit résulter en des particules de vitesses \mathbf{u}', \mathbf{w}' qui satisfont (1.4)-(1.5). La fonction $B(\mathbf{u}, \mathbf{w}, \mathbf{e})$ nommée *noyau de collision*, est non-négative et dépend de la physique (quantique) de

la collision comme les forces électromagnétiques entre les molécules à courte échelle. Dans l'expression (1.3), $d\Omega$ représente l'intégration par rapport à la mesure de Lebesgue normalisée sur la surface de la sphère unité \mathbb{S}^{d-1} . L'équation (1.2) est soumise à une condition initiale et des conditions aux frontières sur $\Gamma = \partial\Omega$, que nous expliciterons dans la Section 1.5.

Interprétation

Considérons le gaz dans un petit élément de volume $\Sigma \times \Delta$ en (\mathbf{x}, \mathbf{u}) dans l'espace de phase où Σ est l'élément de l'espace de vitesse, et Δ un élément de Ω . Alors $dN(t) = d^3\mathbf{x}d^3\mathbf{u}f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ représente le nombre de molécules de gaz situés à l'instant t dans un petit volume $d^3\mathbf{x}$ autour du point \mathbf{x} et ayant une vitesse \mathbf{u} définie à $d^3\mathbf{u}$ près. Le terme $Q(f, f)$ rend compte du taux de collisions entre molécules de vitesse \mathbf{u}, \mathbf{w} produisant des particules de vitesses \mathbf{u}', \mathbf{w}' . L'équation de Boltzmann est une forme compacte exprimant l'équilibre entre "production" et "perte" de particules dans Δ (respectivement les termes positif et négatif de (1.3)).

Hypothèses de validité

Il est important de mentionner le fait que l'équation de Boltzmann ne décrit pas toutes les situations physiques des gaz. Nous présentons ici un sommaire des conditions qui sont implicites dans le modèle (1.2) et (1.3) :

- (i) molécules identiques de masse m , électriquement neutre,
- (ii) les molécules y sont supposées sans structure interne (molécules monoatomiques), ceci implique naturellement que les collisions sont élastiques et "symétriques" puisqu'il ne peut y avoir d'échange d'énergie avec des degrés de liberté internes,

(iii) le gaz est suffisamment dilué, de sorte que seules les collisions binaires sont à considérer,

(iv) seules sont permises les collisions pour lesquelles la conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie sont respectées

$$\mathbf{u} + \mathbf{w} = \mathbf{u}' + \mathbf{w}',$$

$$|\mathbf{u}|^2 + |\mathbf{w}|^2 = |\mathbf{u}'|^2 + |\mathbf{w}'|^2.$$

(v) chaque collision a une durée τ_0 beaucoup plus courte que le temps moyen séparant deux collisions successives

$$\left(\begin{array}{c} \text{Échelle de temps} \\ \text{entre collisions} \\ \text{dans } \Sigma \times \Delta \end{array} \right) \ll \left(\begin{array}{c} \text{Échelle de temps} \\ \text{entre variation} \\ \text{au bord } \partial\Sigma \end{array} \right)$$

(vi) il n'y a pas présence de champs de force externe, entre autres on néglige la gravité,

(vii) la vitesse \mathbf{u} de la particule de gaz est non corrélée avec la position (*stosszahl Ansatz* de Boltzmann),

(viii) Dans une collision entre deux molécules, toute corrélation entre les vitesses d'avant collision et d'après collision est négligée.

La dernière hypothèse d'approximation, dite hypothèse de *chaos moléculaire*, est fondamental dans la théorie cinétique standard : elle est parfaitement justifiée dans le cas de faible densité de gaz. Pour plus d'information, nous suggérons le texte de Huang (Huang, 1987).

1.3 Le noyau de collision

1.3.1 Généralités

Grâce à aux hypothèses (i) – (viii), le noyau de collision $B(\mathbf{u}, \mathbf{w}, \mathbf{e})$ peut s'écrire (Cercignani, 1988), (Ibragimov and S.Rjasanow, 2002) sous la forme

$$B(\mathbf{u}, \mathbf{w}, \mathbf{e}) = |\xi| \sigma(|\xi|, \omega), \quad (1.6)$$

$$\omega = \cos \theta = \frac{(\xi, \mathbf{e})}{|\xi|}. \quad (1.7)$$

La fonction $\sigma : \mathbb{R}_+ \times [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}_+$ est la section efficace différentielle, θ est l'angle de *scattering* et $\xi = \mathbf{u} - \mathbf{w}$. Dans la géométrie de la collision, l'angle θ est l'angle polaire de \mathbf{w}' dans le système de coordonnées sphériques attaché à la molécule en \mathbf{x} avec l'axe z orienté dans la direction ξ (figure 1.1). Le noyau de collision est une description complète de la physique des interactions entre particules que l'on modélise.

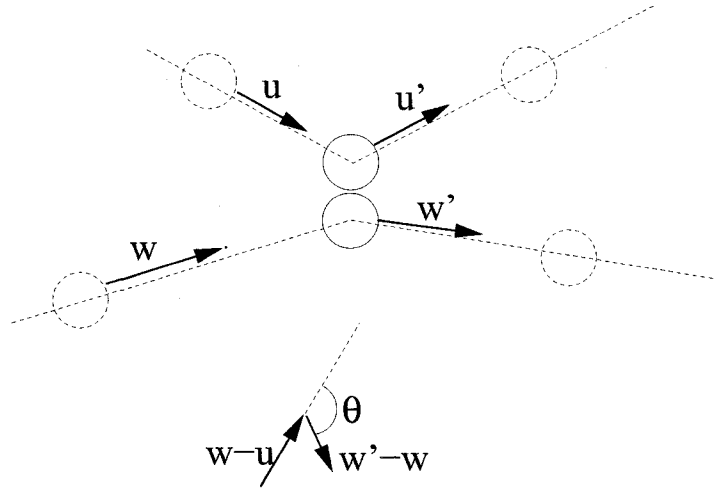


FIGURE 1.1 Géométrie de collision de sphères dures.

1.3.2 Exemples de noyaux de collision

Des modèles standards de noyaux de collision couramment utilisés sont les suivants. Nos travaux s'appliqueront à tous les noyaux satisfaisants 2.1, et en particuliers ceux décrit ci-dessous.

Le modèle de sphère dure

On suppose dans ce modèle, que les collisions consistent en des événements de type balles de billard élastiques entre molécules de rayons finis r_0 . On a (Ibragimov and S.Rjasanow, 2002)

$$\sigma(|\xi|, \omega) = r_0^2,$$

et la section efficace totale est $\sigma_{tot} = \pi r_0^2$.

Le modèle de répulsion en puissance inverse

Dans ce modèle, on considère que le potentiel d'interaction intermoléculaire est inversement proportionnelle à une certaine puissance de la distance de séparation entre les deux molécules partenaires de collision. Le noyau est donné par

$$\sigma(|\xi|, \omega) = |\xi|^{-\frac{4}{m}} h_m(\omega), \quad m > 4,$$

où m est l'ordre du potentiel et h_m est une fonction qui dépend uniquement de l'angle de scattering. Dans le cas $m = 4$, le noyau B ne dépend pas de la vitesse relative $|\xi|$. Ce cas spécial correspond aux pseudo-molécules de Maxwell avec $B(\mathbf{u}, \mathbf{w}, \mathbf{e}) = h_4(\omega)$.

Le modèle de Lennard-Jones

Ce modèle constitue une force d'interaction intermoléculaire plus réaliste (figure 1.2) sous la forme d'une combinaison de lois de puissance (Lennard-Jones, 1931), (Hill, 1986)

$$U(r) = U_0 \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{a}{r} \right)^6 \right], \quad U_0, a \text{ constantes.}$$

où U_0 est la *profondeur* du puits de potentiel, et r est la distance entre les deux particules en interaction. Le potentiel Lennard-Jones est un modèle mathématique simple qui représente assez bien le comportement physique à courte et à grande séparation interatomique : une force attractive à longue portée et une force répulsive à courte portée. Le potentiel atteint son minimum $-U_0$ en $r = a$.

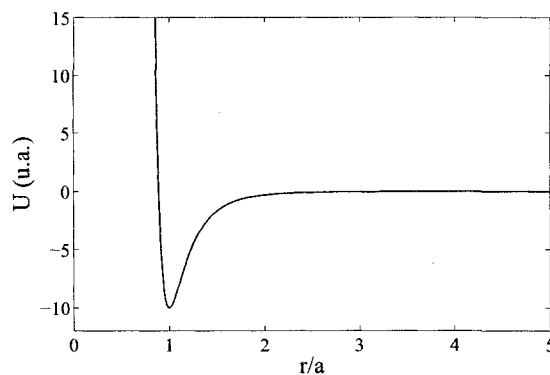


FIGURE 1.2 Potentiel de Lennard-Jones.

Les grandeurs U_0 et a , qui ont les dimensions d'énergie et de longueur respectivement, sont des constantes caractéristiques de l'espèce chimique des particules en collision.

1.4 Propriétés

Invariants collisionnels

On définit un invariant collisionnel (ou invariant de collision) comme une fonction $\Phi(\mathbf{u})$ telle que

$$\int Q(f, f)(\mathbf{u}) \Phi(\mathbf{u}) d\mathbf{u} = 0, \quad \forall f.$$

On a alors (Cercignani, 1988), (Cercignani et al., 1994) Φ est un invariant collisionnel si et seulement si elle satisfait

$$\Phi(\mathbf{u}') + \Phi(\mathbf{u}_1') - \Phi(\mathbf{u}) - \Phi(\mathbf{u}_1) = 0 \quad (1.8)$$

$\forall (\mathbf{u}, \mathbf{u}_1, \mathbf{u}', \mathbf{u}_1')$ tel que $\exists \mathbf{n}$ et $(\mathbf{u}', \mathbf{u}_1') = J_{\mathbf{n}}(\mathbf{u}, \mathbf{u}_1)$, où pour \mathbf{n} fixé dans \mathbb{S}^2 , $J_{\mathbf{n}} : (\mathbf{u}, \mathbf{u}_1) \rightarrow (\mathbf{u}', \mathbf{u}_1')$ est l'application de transformée de collision définie par

$$\mathbf{u}' = \mathbf{u} - (\mathbf{u} - \mathbf{u}_1, \mathbf{n})\mathbf{n}, \quad (1.9)$$

$$\mathbf{u}_1' = \mathbf{u}_1 + (\mathbf{u} - \mathbf{u}_1, \mathbf{n})\mathbf{n}. \quad (1.10)$$

Proposition 1.4.1. *Si Φ est suffisamment "lisse" (exemple continu) alors (1.8) est équivalent au fait qu'il existe des constantes $A, C \in \mathbb{R}$ et un vecteur $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^3$ tels que*

$$\Phi(\mathbf{u}) = A + \mathbf{B} \cdot \mathbf{u} + C |\mathbf{u}|^2. \quad (1.11)$$

On peut alors remarquer que les invariants collisionnels sont associés aux quantités

conservées pour fluide. En effet, (1.11) implique que

$$\int Q(f, f)(\mathbf{u}) \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{u} \\ |\mathbf{u}|^2 \end{pmatrix} d\mathbf{u} = 0.$$

Ces trois identités expriment respectivement que les collisions préservent masse, quantité de mouvement et énergie.

Proposition 1.4.2. *Que tous les invariants collisionnels sont de la forme (1.11) signifie qu'il n'existe aucune autre quantité conservée autre que les combinaisons linéaires de masse, quantité de mouvement et énergie. Les fonctions*

$$\Psi_0 = 1, \quad (\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3) = \mathbf{u}, \quad \Psi_4 = |\mathbf{u}|^2, \quad (1.12)$$

sont souvent appelées invariants collisionnels élémentaires.

Pour une preuve détaillée de cette propriété, nous référons le lecteur à (Cercignani, 1988), (Glassey, 1996).

Distribution d'équilibre : état maxwellien

Les états d'équilibre thermodynamique de gaz sont définis comme les distributions f qui annulent l'opérateur de collision : $Q(f, f) = 0$. Les fonctions de distribution d'équilibre sont appelées *distributions maxwelliennes* dont une expression peut être donnée sous la forme

$$M_{n_0, \mathbf{u}_0, T_0} = \frac{n_0}{(2\pi T_0)^{3/2}} \exp\left(-\frac{|\mathbf{u} - \mathbf{u}_0|^2}{2T_0}\right).$$

On reconnaît ici une gaussienne dans l'espace des vitesses où les quantités n_0, \mathbf{u}_0, T_0 ne sont rien d'autre que la densité, vitesse moyenne et température de la gaussienne, c'est à dire sa masse totale, sa moyenne et sa déviation quadratique moyenne.

Théorème H : état loin d'équilibre, évolution vers l'équilibre

Le théorème H a été formulé par Boltzmann dans le cadre de la théorie cinétique des gaz, lorsqu'un gaz hors d'équilibre vérifie son équation. Selon ce théorème, il existe une certaine grandeur $H(t)$ qui varie de façon monotone au cours du temps, pendant que le gaz relaxe vers l'état d'équilibre caractérisé par la distribution de Maxwell.

Proposition 1.4.3 ((Boltzmann, 1872)). Soit $f = f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ solution de l'équation (1.2) et la fonctionnelle H définie par

$$H(t) = \int f \ln f d^3\mathbf{x} d^3\mathbf{u},$$

où l'intégration $d^3\mathbf{x}$ est réalisée sur le volume total du système considéré. Alors

$$\frac{dH}{dt} \leq 0. \quad (1.13)$$

En pratique, $H(t)$ mesure l'entropie totale du fluide et la contrainte (1.13) est le fameux deuxième principe de la thermodynamique. La densité d'entropie mathématique $f \ln f$ est l'opposé de la densité d'entropie physique, d'où la décroissance en (1.13).

1.5 Conditions initiales et aux frontières

L'équation de Boltzmann (1.2) est soumise à la condition initiale

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t = 0) = f_0(\mathbf{x}, \mathbf{u}), \quad f_0 : \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_+, \quad (1.14)$$

ainsi qu'une condition aux frontières pour $\mathbf{x} \in \Gamma = \partial\Omega$.

Désignons par $\mathbf{n}_\mathbf{x}$ le vecteur normal entrant à la frontière Γ au point $\mathbf{x} \in \Gamma$, et

$$\begin{aligned} \mathbb{R}_{in}^3(\mathbf{x}) &= \{\mathbf{w} \in \mathbb{R}^3 : (\mathbf{w}, \mathbf{n}_\mathbf{x}) > 0\}, \\ \mathbb{R}_{out}^3(\mathbf{x}) &= \{\mathbf{w} \in \mathbb{R}^3 : (\mathbf{w}, \mathbf{n}_\mathbf{x}) \leq 0\}. \end{aligned}$$

Les conditions aux frontières s'écrivent alors [(Cercignani et al., 1994), chp.8]

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)(\mathbf{u}, \mathbf{n}_\mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}_{out}^3(\mathbf{x})} K_S(\mathbf{x}, t; \mathbf{w} \rightarrow \mathbf{u}) f(\mathbf{x}, \mathbf{w}, t) |(\mathbf{w}, \mathbf{n}_\mathbf{x})| d^3\mathbf{w}, \quad (1.15)$$

exprimant le lien entre le flux entrant de particules

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)(\mathbf{u}, \mathbf{n}_\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Gamma, \quad \mathbf{u} \in \mathbb{R}_{in}^3(\mathbf{x}),$$

et le flux sortant de particules

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) |(\mathbf{u}, \mathbf{n}_\mathbf{x})|, \quad \mathbf{x} \in \Gamma, \quad \mathbf{u} \in \mathbb{R}_{out}^3(\mathbf{x}),$$

à la frontière $\Gamma = \partial\Omega$ du domaine physique, en utilisant un opérateur *noyau de diffusion* $K_S(\mathbf{x}, t; \mathbf{w} \rightarrow \mathbf{u})$. Dans le contexte de notre recherche, nous utiliserons uniquement les deux types de conditions aux frontières suivantes :

(a) Réflexion spéculaire

Pour ce cas,

$$K_S(\mathbf{x}, t; \mathbf{w} \rightarrow \mathbf{u}) = \delta\left(\mathbf{w} - (\mathbf{u} - 2(\mathbf{u}, \mathbf{n}_x))\right),$$

et alors la condition (1.15) prend la forme

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)(\mathbf{u}, \mathbf{n}_x) = f(\mathbf{x}, \mathbf{u} - 2(\mathbf{u}, \mathbf{n}_x), t), \quad \mathbf{x} \in \Gamma, \quad \mathbf{u} \in \mathbb{R}_{in}^3(\mathbf{x}),$$

La masse et l'énergie sont conservées pour cette condition aux frontières.

(b) Condition aux frontières de flux entrant :

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)(\mathbf{u}, \mathbf{n}_x) = f_{in}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)(\mathbf{u}, \mathbf{n}_x), \quad \mathbf{x} \in \Gamma, \quad \mathbf{u} \in \mathbb{R}_{in}^3(\mathbf{x}).$$

1.6 Existence de solution

La question de l'existence et unicité de solutions de l'équation de Boltzmann constitue un problème mathématique important et difficile : elle demeure un champ actif de recherche scientifique théorique. Le développement de telles théories est d'intérêt multiple.

Ce problème s'inscrit dans le programme général de comprendre les méthodes mathématiques des phénomènes de la mécanique classique. En fait, les propriétés mathématiques des modèles classiques continus, telle que la question de l'existence de solutions de l'équation de Navier-Stokes, pour $t \gg 0$, sont intimement reliées aux propriétés de l'équation de Boltzmann.

La question théorique détaillée de l'existence est hors du contexte de notre présente

recherche. Néanmoins, à titre indicatif, nous référons dans la suite le lecteur à quelques résultats clés publiés par divers auteurs :

Équation homogène

Pour l'équation de Boltzmann homogène en espace du type

$$\frac{\partial f}{\partial t} = Q(f, f),$$

une théorie d'existence raisonnablement complète est disponible. Le premier résultat d'existence et unicité de solutions classiques est dû à Carleman (Carleman, 1933), (Carleman, 1957a). Ce résultat fut plus tard raffiné et complété par Arkeryd (Arkeryd, 1972a), (Arkeryd, 1972b). On peut aussi mentionner les progrès récemment réalisés par plusieurs auteurs sur le comportement de la solution aux grandes valeurs de temps et sa convergence à une Maxwellienne quand $t \rightarrow \infty$ dont Desvillettes (Desvillettes, 1993) et Wennberg (Wennberg, 1995).

Équation non homogène

Une des difficultés du traitement théorique de l'équation de Boltzmann réside dans la non linéarité quadratique de l'opérateur de collision $Q(f, f)$. Un travail de référence sur la question d'existence de solution pour l'équation de Boltzmann non homogène en espace demeure celui de DiPerna et Lions (DiPerna and Lions, 1989) qui ont réussi à surmonter cette difficulté en introduisant le concept de solutions renormalisées et dont une extension aux problèmes aux frontières a été réalisée dans (Hamdache, 1992). Une fonction f est dite une solution renormalisée de l'équation de Boltzmann si elle satisfait

l'identité

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + v \cdot \nabla_x \right) L(f) = L'(f) Q(f) \quad \text{dans } \mathcal{D}',$$

$$\forall L \text{ Lipschitz, t.q. } |L'(f)| \leq C/(1 + f).$$

L'idée principale de la renormalisation est qu'avec la condition ci-dessus sur L , $L'(f)Q(f, f)$ croît linéairement avec f : ce qui permet de traiter la nonlinéarité du problème, "comme si elle était linéaire". Nous référons le lecteur au travail original (DiPerna and Lions, 1989) ou (Cercignani et al., 1994) pour les détails de la théorie.

1.7 Connexion microscopique-macroscopique

1.7.1 Grandeurs physiques

Toutes les propriétés physiques pertinentes de l'écoulement d'un gaz sont calculables à partir des premiers moments (ou de leurs combinaisons) de la fonction de distribution f . Ces moments sont la densité $\bar{\rho}(\mathbf{x}, t)$, la quantité de mouvement $\bar{\mathbf{m}}(\mathbf{x}, t)$, le flux de quantité de mouvement $\phi_m(\mathbf{x}, t)$ et le vecteur flux d'énergie $\phi_e(\mathbf{x}, t)$ donnés par

$$\bar{\rho}(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) d^3 \mathbf{u}, \quad (1.16)$$

$$\bar{\mathbf{m}}(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{u} f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) d^3 \mathbf{u}, \quad (1.17)$$

$$\phi_m(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{u} \mathbf{u}^T f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) d^3 \mathbf{u}, \quad (1.18)$$

$$\phi_e(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{u} |\mathbf{u}|^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) d^3 \mathbf{u}. \quad (1.19)$$

Les grandeurs physiques suivantes sont alors définies à partir de ces moments

$$\text{vitesse de volume} \quad \bar{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t) = \frac{\bar{\mathbf{m}}}{\bar{\rho}}, \quad (1.20)$$

$$\text{énergie interne} \quad \bar{e}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2\rho} (\text{tr} \phi_m - \rho |\bar{\mathbf{v}}|^2), \quad (1.21)$$

$$\text{température} \quad \bar{T}(\mathbf{x}, t) = \frac{2}{3R} \bar{e}, \quad (1.22)$$

$$\text{pression} \quad \bar{p}(\mathbf{x}, t) = \bar{\rho} R \bar{T}, \quad (1.23)$$

$$\text{stress tensor} \quad P(\mathbf{x}, t) = \phi_m - \bar{\rho} \bar{\mathbf{v}} \bar{\mathbf{v}}^T, \quad (1.24)$$

$$\text{flux de chaleur} \quad \mathbf{q}(\mathbf{x}, t) = \phi_e - \left(\phi_m + (1/2 \text{tr} \phi_m - \rho |\bar{\mathbf{v}}|^2) I \right) \bar{\mathbf{v}}, \quad (1.25)$$

où I est la matrice identité, R une constante reliée à la masse moléculaire moléculaire moyenne \bar{M}_m et la constante universelle de Boltzmann k ($k = 1.38 \times 10^{-23} J/^\circ K$) par $R = k/\bar{M}_m$. Des équations (1.22) et (1.23), on déduit la relation suivante, appelée *l'équation d'état* du gaz,

$$\bar{p} = \frac{2}{3} \bar{\rho} \bar{e}, \quad (1.26)$$

qui permet d'exprimer une quelconque des trois quantités \bar{p} , $\bar{\rho}$, \bar{e} en fonction des deux autres.

1.7.2 Équations de conservation

Les quantités macroscopiques, ci-dessus définies, satisfont des équations différentielles particulières. Ces équations souvent appelées équations de conservation (de masse, quantité de mouvement et énergie) peuvent être obtenues à partir de l'équation de Boltzmann. En effet, en multipliant l'équation de Boltzmann (1.2) par les invariants collisionnels élémentaires Ψ_α , $\alpha = 0, \dots, 4$, définis dans (1.12), et en intégrant par rapport à la vi-

tesse \mathbf{u} ,

$$\partial_t \int \Psi_\alpha f d\mathbf{u} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \int \Psi_\alpha f d\mathbf{u} = \int \Psi_\alpha Q(f, f)(\mathbf{u}) f d\mathbf{u} = 0, \quad (1.27)$$

l'on obtient après réarrangement des termes, les cinq équations suivantes (Cercignani, 1988), (Cercignani et al., 1994), (Glassey, 1996) :

$$\partial_t \bar{\rho} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\bar{\rho} \bar{\mathbf{v}}) = 0, \quad (1.28)$$

$$\partial_t (\bar{\rho} \bar{\mathbf{v}}_j) + \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} (P_{ij} + \bar{\rho} \bar{\mathbf{v}}_i \bar{\mathbf{v}}_j) = 0, \quad j = 1, 2, 3 \quad (1.29)$$

$$\partial_t \left(\bar{\rho} (\bar{e} + 1/2 |\bar{\mathbf{v}}|^2) \right) + \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} \bar{\mathbf{v}}_i (\bar{e} + 1/2 |\bar{\mathbf{v}}|^2) + \sum_j \bar{\mathbf{v}}_j P_{ij} + q_i \right) = 0. \quad (1.30)$$

Les équations (1.28), (1.29), (1.30) constituent les cinq équations macroscopiques de base de la mécanique des fluides. Ces cinq équations ont plus de cinq inconnues (quatorze inconnues) : dont deux inconnues scalaires ρ , \bar{e} , six inconnues provenant des vecteurs \mathbf{q} , $\bar{\mathbf{v}}$ et six inconnues pour la matrice P (matrice 3×3 symétrique). En tenant compte de la relation connue

$$\sum_i P_{ii} = 2\bar{\rho}\bar{e}, \quad (1.31)$$

le nombre d'inconnues se ramène à treize. Il s'avère important d'imposer des *équations constitutives* pour relier P_{ij}, q_i à $\bar{\rho}$, $\bar{\mathbf{v}}_i$, \bar{e} . Deux exemples bien connues sont

(a) *le modèle de fluide idéal*, dans lequel

$$P_{ij} = p\delta_{ij}, \quad q_i = 0, \quad (1.32)$$

conduisant aux équations classiques d'Euler,

(b) *le modèle de fluide visqueux*, dans lequel

$$\begin{aligned} P_{ij} &= p\delta_{ij} - \mu\left(\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i}\right) - \lambda \sum_k \frac{\partial \bar{v}_k}{\partial x_k} \delta_{ij}, \\ q_i &= -\kappa \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i}, \end{aligned} \quad (1.33)$$

(où μ et λ sont des coefficients de viscosité et κ le coefficient de conduction thermique), conduisant aux équations classiques de Navier-Stokes.

Bien que l'approche macroscopique est plus simple (5 fonctions de 4 variables) que l'approche microscopique (1 fonction de 7 variables) et donc lui est préférable dans bien des applications, il existe néanmoins des régimes de raréfaction pour lesquels les équations constitutives ne sont pas valides ; dans ces cas, il n'y a pas d'autre choix que de résoudre effectivement l'équation de Boltzmann.

1.8 Méthodes numériques usuelles

L'un des problèmes pratiques majeurs associés à l'équation de Boltzmann est la construction de méthodes numériques efficaces pour l'approximation de ses solutions. Parmi les différentes approches pour l'approximation de l'équation de Boltzmann, on doit distinguer deux familles principales de méthodes : les méthodes déterministes et les méthodes Monte Carlo. Les secondes sont les plus couramment utilisés, de nos jours, et sont basées sur des simulations stochastiques. Chacune de ces deux familles présentent des avantages et des inconvénients. Entre autres, les méthodes déterministes génèrent généralement des solutions précises libres d'oscillations mais plus coûteuses que les méthodes stochastiques, pour un même nombre de degrés de liberté discrètes. Les méthodes Monte Carlo sont souvent préférés pour les régimes très éloignés de l'équilibre thermodynamique, tandis que les méthodes déterministes sont compétitives pour les situations pas très

éloignées de l'équilibre thermodynamique et celles où une haute précision est exigée. Nous mentionnons maintenant quelques méthodes couramment utilisées.

La méthode de simulation directe Monte Carlo

La méthode classique de particules introduite par G.A.Bird (Bird, 1970), (Bird, 1976), (Bird, 1994) et Nanbu (Nanbu, 1981), (appelée "Direct simulation Monte Carlo" ou méthode DSMC), fût dérivée sur la base d'intuition physique. Elle a depuis lors gagné une grande popularité. La méthode DSMC a été utilisée avec succès pour les écoulements hypersoniques (Long, 1991) dans des conditions où l'hypothèse du continu et les équations de Navier-Stokes traditionnelles ne sont plus valides. Plutôt que de calculer exactement les collisions comme en dynamique moléculaire, la méthode DSMC génère des collisions entre des particules choisies aléatoirement avec des taux de "diffusion" et des distributions de vitesses post-collisionnelles déterminées à partir de la théorie cinétique d'un gaz dilué. Bien que les simulations DSMC ne soient pas correctes à l'échelle de longueur aussi courte que celle du diamètre atomique, elles sont "précises" aux échelles plus petites que celles d'un libre parcours moyen.

La méthode stochastique de particule pondérée

Les méthodes stochastiques de particule pondérée (Stochastic weighted particle method) ont été introduites par Rjasanow et Wagner (Rjasanow and Wagner, 1996a), (Rjasanow and Wagner, 1996b), (Rjasanow and Wagner, 2001). Ces algorithmes utilisent une procédure générale de modélisation des collisions entre particules basée sur un transfert aléatoire de poids à partir des particules avec des vitesses pré-collisionnelles vers des particules avec des vitesses post-collisionnelles. Cet algorithme généralise la méthode

standard de simulation directe Monte Carlo, qui y est contenue comme un cas particulier. Une théorie de convergence solide a été élaborée pour cette méthode (Rjasanow and Wagner, 1996a). Ces méthodes sont compétitives avec les méthodes spectrales.

Les méthodes spectrales

L'approximation spectrale est fondée sur une discrétisation de l'opérateur de collision basée sur un développement en série de Fourier de la fonction de distribution en fonction de la variable vitesse (Bobylev and Rjasanow, 1997), (Pareschi and Perthame, 1996). Ces méthodes, étant spectrales par rapport à la vitesse, sont adaptatives par rapport à leur discrétisation en espace de vitesse. Bien que ces méthodes sont très rapides du point de vue algorithmique, les preuves de convergence sont plus rares. Pour une description détaillée de l'approche spectrale à l'équation de Boltzmann et d'autres équations cinétiques voir par exemple (Pareschi, 2003).

La méthode des modèles à vitesse discrète

Les modèles à vitesse discrète (MVD) de l'équation de Boltzmann sont des modèles où la vitesse est discrétisée, i.e la vitesse est supposée être capable de prendre uniquement un nombre fini de valeurs différentes (Buet, 1996), (Inamuro and Sturtevant, 1990). L'équation de Boltzmann peut être approchée par les MVD et ces approximations peuvent être utilisées pour des méthodes numériques. Nous présentons plus loin (dans le prochain chapitre) une étude détaillée de ce modèle. Ce mémoire concerne une implémentation particulière de ce modèle dit l'algorithme de Illner & Rjasanow (Illner and Rjasanow, 1994) qui est un modèle hybride déterministe-stochastique. Nous référons

le lecteur à la Section 2.2 pour une description plus complète du modèle de Illner & Rjasnow.

Les modèles de Boltzmann sur réseau

Historiquement, les modèles de l'équation de Boltzmann sur réseau (en anglais *Lattice Boltzmann models*) sont des *évolutions directes* des modèles d'automates sur gaz de réseau (en anglais *Lattice Gas Automata models*). Les systèmes automates sur gaz de réseau (AGR) peuvent être décrits de la manière suivante. Considérons un réseau formé de sommets (noeuds) et d'arêtes reliant les sommets. Plaçons des particules ponctuelles sur les noeuds avec des vitesses dans la direction des arêtes, avec au plus une particule avec une vitesse donnée en chaque sommet. Ensuite, supposons qu'à des temps discrets, chaque particule se déplace d'un noeud à un noeud voisin et qu'à son arrivée sa vitesse est ajustée conformément à un ensemble de règles de collision déterministes ou stochastiques dépendant du nombre et des vitesses des autres particules arrivant à ce même noeud au même instant. Après ajustement des vitesses de toutes les particules, le processus est répété.

Alors que les modèles AGR sont des modèles booléens, les modèles de Boltzmann sur réseau (MBR) sont des équivalents en nombres à virgule flottante des modèles LGA correspondants. Une particule dans le modèle AGR (représentée par un nombre booléen) est remplacée par une fonction de distribution de particule (représentée par un nombre réel). Les MBR considèrent un élément de volume typique du fluide comme composé d'une collection de particules représentées par une fonction de distribution de vitesse pour chaque composante de fluide en chaque noeud du réseau. Les particules sont contraintes à se déplacer sur le réseau (hexagonal, carré avec diagonales, ou autres) le long des arêtes. Le temps est compté en pas discrets et les particules de fluides peuvent entrer en collision entre eux lors de leurs déplacements. Les règles qui régissent les collisions sont

conçues de sorte que le mouvement moyen des particules est consistant avec l'équation de Navier-Stokes. Malgré le lien historique entre les MBR et les AGR, les MBR peuvent néanmoins être considérés comme une forme spéciale de discrétisation de l'équation de Boltzmann continue (He and Luo, 1997).

Parmi les avantages des modèles MBR, on peut citer sa capacité à représenter facilement les phénomènes physiques complexes tels que les écoulements multiphasés (Shan and Chen, 1993), (Shan and Chen, 1994), (Swift et al., 1995), les interactions chimiques entre le fluide et les surfaces de frontières, les écoulements chimiquement réactifs (Chen et al., 1995) ainsi que la facilité de traiter les géométries de domaines complexes. Il existe actuellement une grande diversité de modèles de Boltzmann sur réseau, caractérisés par le choix de modélisation de l'opérateur de collision, le choix de l'évaluation de la distribution d'équilibre et la forme du temps de relaxation. Nous référons le lecteur aux articles suivants pour plus de détails concernant les modèles particuliers. Une revue de la littérature concernant le modèle de Boltzmann sur réseau avec opérateur de collision BGK peut être obtenue dans (Chen and Doolen, 1998). L'article de d'Humières et al. traite du modèle de relaxation de temps multiple le plus communément utilisé (d'Humières et al., 2002). Un autre modèle dit modèle régularisé est introduit dans (Latt and Chopard, 2006). Le modèle entropique de Boltzmann sur réseau est décrit dans (Ansumali and Karlin, 2002), (Ansumali et al., 2003).

CHAPITRE 2

MODÈLES À VÉLOCITÉ DISCRÈTE

Les modèles à vélocité discrète (MVD) standards constituent une approximation simple de l'équation de Boltzmann où l'espace continu des vitesses est remplacé par un ensemble discret. Ces modèles ont été étudiés depuis longtemps en théorie cinétique (Broadwell, 1964), (Carleman, 1957a), (Carleman, 1957b), (Gatignol, 1975), (Cabannes, 1975), (Cabannes, 1980), (Monaco and Preziosi, 1991), (Godunov and Sultanghazin, 1971). L'idée principale étant de reproduire les propriétés formelles de l'équation de Boltzmann en utilisant un nombre fini de vélocités discrètes, ce qui offrirait l'avantage d'être plus simple à étudier, soit analytiquement ou numériquement.

L'objectif de ce chapitre est de présenter la théorie des MVD. Des éléments de la théorie générale sont présentés dans la Section 2.1, un cas particulier de MVD sera décrit dans la Section 2.2, puis nous en présenterons dans la Section 2.3 un algorithme pour résoudre numériquement l'équation de Boltzmann à l'aide d'un MVD.

2.1 Théorie cinétique discrète générale

Le modèle général à vélocité discrète (MVD) s'écrit

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_i}{\partial t}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{u}_i \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_i(\mathbf{x}, t) &= Q_i(\mathbf{f}, \mathbf{f}), \quad i = 1, 2, \dots, n \\ f_i(\mathbf{x}, 0) &= f_{i0}(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (2.1)$$

où $\mathbf{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^d$ ($d = 1, 2$ ou 3) est la variable d'espace (physique), $t \in \mathbb{R}^+$ est la variable de temps, $\mathcal{F} = \{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_n : \mathbf{u}_i \in \mathbb{R}^d, i = 1, \dots, n\}$ est un ensemble fini

de vitesses, $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_n)$, $f_i = f_i(\mathbf{x}, t) = f(\mathbf{x}, \mathbf{u}_i, t)$ pour $1 \leq i \leq n$ est la fonction de distribution de particules se déplaçant à vitesse fixe \mathbf{u}_i au temps t . L'opérateur de collision $Q_i(\mathbf{f}, \mathbf{f})$ dans (2.1) est donné par

$$Q_i(\mathbf{f}, \mathbf{f}) = \sum_{j,k,l=1}^n A_{kl}^{ij} (f_k f_l - f_i f_j), \quad \text{pour } i = 1, 2, \dots, n, \quad (2.2)$$

où il est supposé que les coefficients de collision A_{kl}^{ij} , $1 \leq i, j, k, l \leq n$, satisfont les relations : $A_{ij}^{kl} = A_{ji}^{kl} = A_{kl}^{ij} \geq 0$ si les lois de conservation (2.3)-(2.4)

$$\mathbf{u}_i + \mathbf{u}_j = \mathbf{u}_k + \mathbf{u}_l, \quad (2.3)$$

$$|\mathbf{u}_i|^2 + |\mathbf{u}_j|^2 = |\mathbf{u}_k|^2 + |\mathbf{u}_l|^2. \quad (2.4)$$

sont satisfaites. Si les paires (i, j) et (k, l) ne satisfont pas (2.3)-(2.4), alors $A_{kl}^{ij} = 0$.

Le modèle considère un gaz de particules dans l'espace \mathbb{R}^d ($d = 1, 2$, ou 3), où chaque particule peut seulement se déplacer avec une vitesse appartenant à l'ensemble $\mathcal{V} = \{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n\} \subset \mathbb{R}^d$. Les collisions binaires entre particules avec vitesses $\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j$ dans \mathcal{V} (avant collision) résultent en des particules avec vitesses $\mathbf{u}_k, \mathbf{u}_l$ dans \mathcal{V} (après collision), où seules sont autorisées les collisions pour lesquelles les moments et l'énergie sont conservés selon (2.3)-(2.4). Une collision transférant la paire de vitesses $(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j)$ en la paire $(\mathbf{u}_k, \mathbf{u}_l)$ sera notée, par la suite, $(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j) \rightarrow (\mathbf{u}_k, \mathbf{u}_l)$. L'évolution de l'élément de gaz pourra être décrite en introduisant n fonctions densités $f_i = f_i(\mathbf{u}, t)$, $i = 1, 2, \dots, n$ décrivant la densité de particules se mouvant à vitesse \mathbf{u}_i au temps t . On comprend intuitivement que $f_i(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}$ décrit la fraction (ou le nombre) de particules avec vitesse \mathbf{u}_i dans un volume infinitésimal $d\mathbf{x}$ autour du point \mathbf{x} au temps t . Nous prendrons maintenant le temps de décrire plus en détails la signification des coefficients de collisions A_{kl}^{ij} .

Nous supposons que si deux particules entrent en collision avec vitesses \mathbf{u}_i et \mathbf{u}_j , res-

pectivement, alors il existe une probabilité $p_{kl}^{ij} \geq 0$ que leurs vitesses post-collisionnelles soient \mathbf{u}_l et \mathbf{u}_k ; p_{kl}^{ij} est appelé *probabilité de transition*. La conservation de masse, de quantité de mouvement et d'énergie, ainsi que le postulat d'indiscernabilité des particules impliquent que

$$\begin{aligned}
 (i) \quad & \sum_{k,l} p_{kl}^{ij} = 1 \\
 (ii) \quad & p_{kl}^{ij} = p_{lk}^{ij} = p_{kl}^{ji} \\
 (iii) \quad & p_{im}^{in} = 0 \quad \text{si } n \neq m \\
 (iv) \quad & p_{kl}^{ii} = p_{il}^{kl} \quad \text{si } k \neq i \quad \text{ou } l \neq i \\
 (v) \quad & p_{kl}^{ij} = 0 \quad \text{si (2.3) ou (2.4) ne sont pas vérifiées} \\
 (vi) \quad & p_{kl}^{ij} = p_{ij}^{kl}.
 \end{aligned} \tag{2.5}$$

La condition (vi) ci-dessus vient du fait que, généralement, on suppose que les probabilités de collisions directe et inverse sont égales : c'est le postulat de la réversibilité microscopique (ou micro-réversibilité). Des considérations mécaniques simples nous permettent alors de conclure que le taux de collision $(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j) \rightarrow (\mathbf{u}_k, \mathbf{u}_l)$ est

$$A_{kl}^{ij} \propto p_{kl}^{ij} |\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j|. \tag{2.6}$$

où la constante de proportionnalité est de l'ordre de $1/\tau$ (où τ est le libre parcours moyen "mean free path"). On a que $A_{ij}^{kl} = A_{kl}^{ij}$ si et seulement si $p_{ij}^{kl} = p_{kl}^{ij}$. En effet, (1.4)-(1.5) impliquent que $|\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j| = |\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_l|$. À partir de ces observations, le taux B_i^{kl} de production de particules avec vitesse \mathbf{u}_i sera

$$B_i^{kl} = \sum_{j=1}^N A_{kl}^{ij} - \frac{1}{2} \sum_{m,n=1}^N A_{kl}^{mn} \delta_{ik} - \frac{1}{2} \sum_{m,n=1}^N A_{kl}^{mn} \delta_{li}, \tag{2.7}$$

où δ_{ik} est le symbole de Kronecker. L'opérateur de collision (2.2) peut être réécrit sous

la forme compacte

$$Q_i(\mathbf{f}, \mathbf{f}) = \sum_{k,l=1}^n B_i^{kl} f_k f_l, \quad \text{pour } i = 1, 2, \dots, n. \quad (2.8)$$

2.1.1 Un exemple simple : modèle 3D de Broadwell

Broadwell a proposé (Broadwell, 1964) un modèle à vitesses discrètes simple tant du point de vue mathématique que physique. Malgré sa simplicité, il a tout de même démontré que certaines propriétés thermodynamiques étaient fidèlement reproduites, telles que la vitesse et la structure interne des ondes de chocs, ainsi que la vitesse du son dans un tel "gaz".

Dans son modèle de gaz, il considère des particules de masses identiques, se déplaçant selon les trois directions de coordonnées perpendiculaires avec le même module de vitesse u (figure 2.1). Le modèle de Broadwell est décrit par le système d'équations

$$\begin{aligned} (\partial_t + u\partial_x)f_1 &= \sigma(f_3f_4 + f_5f_6 - 2f_1f_2) \\ (\partial_t - u\partial_x)f_2 &= \sigma(f_3f_4 + f_5f_6 - 2f_1f_2) \\ (\partial_t + u\partial_y)f_3 &= \sigma(f_1f_2 + f_5f_6 - 2f_3f_4) \\ (\partial_t - u\partial_y)f_4 &= \sigma(f_1f_2 + f_5f_6 - 2f_3f_4) \\ (\partial_t + u\partial_z)f_5 &= \sigma(f_1f_2 + f_3f_4 - 2f_5f_6) \\ (\partial_t - u\partial_z)f_6 &= \sigma(f_1f_2 + f_3f_4 - 2f_5f_6) \end{aligned}$$

où tous les résultats de collision sont supposés équiprobables (i.e la section efficace de toute collision possible est identique) et où uniquement les collisions binaires sont prises en considération. Ceci implique que $\sigma = \tilde{\sigma}g$, $\tilde{\sigma}$ est la section efficace de collision binaire, $g = 2u$ est le module de la vitesse relative de deux particules en collision se déplaçant

en sens opposés, voir Chapitre 1, Section 1.3.

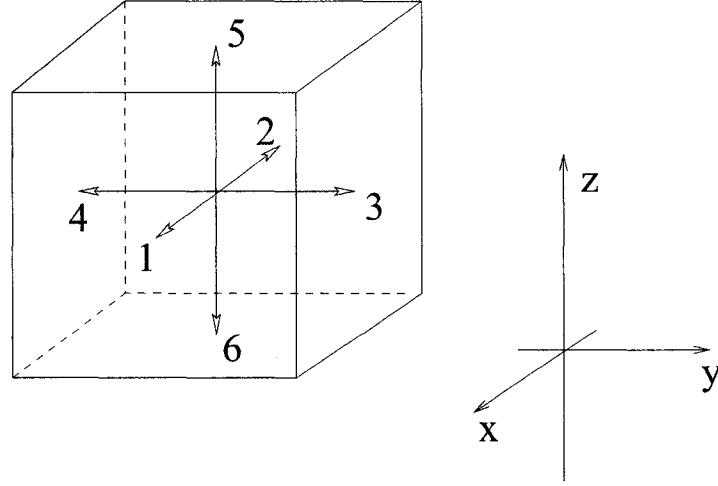


FIGURE 2.1 Modèle à 6-vitesses de Broadwell.

On peut dériver une forme encore plus simple d'écoulements pour lesquelles les f sont indépendants de y et z en imposant $f_3 = f_4 = f_5 = f_6$.

$$(\partial_t + u\partial_x)f_1 = \frac{1}{\epsilon}(f_3^2 - f_1f_2) \quad (2.9)$$

$$(\partial_t - u\partial_x)f_2 = \frac{1}{\epsilon}(f_3^2 - f_1f_2) \quad (2.10)$$

$$\partial_t f_3 = \frac{1}{2\epsilon}(f_1f_2 - f_3^2) \quad (2.11)$$

où $\epsilon = \frac{1}{2\sigma}$ correspond au nombre de Knudsen et toutes les quantités ont été normalisées.

2.1.2 Autres exemples

Il existe d'autres modèles simples en deux et trois dimensions. Dans le cas 2-D, on peut citer par exemple le modèle à 8-vitesses dont les vecteurs vitesses sont construites de la manière suivante. Considérons un carré centré à l'origine de l'espace des vitesses. Un

vecteur vitesse du modèle est construit soit en joignant le centre du carré à un sommet du carré, soit en joignant le centre du carré au milieu d'un de ses cotés (figure 2.2). Dans le cas 3-D, un autre modèle intéressant est celui de Cabannes à 14-vitesses (Cabannes, 1975) dont les vecteurs vitesses sont construits de la manière suivante. Considérons un cube centré à l'origine de l'espace des vitesses. On construit un vecteur vitesse du modèle de Cabannes en joignant le centre du cube à ses sommets, ou en joignant le centre du cube aux centres de ses faces. Il existe une littérature abondante portant sur la manière de construire et analyser des modèles MVD physiquement réalistes (c'est à dire qui satisfont les lois de conservation appropriées et un principe d'entropie), voir par exemple (Bobylev and Cercignani, 1999).

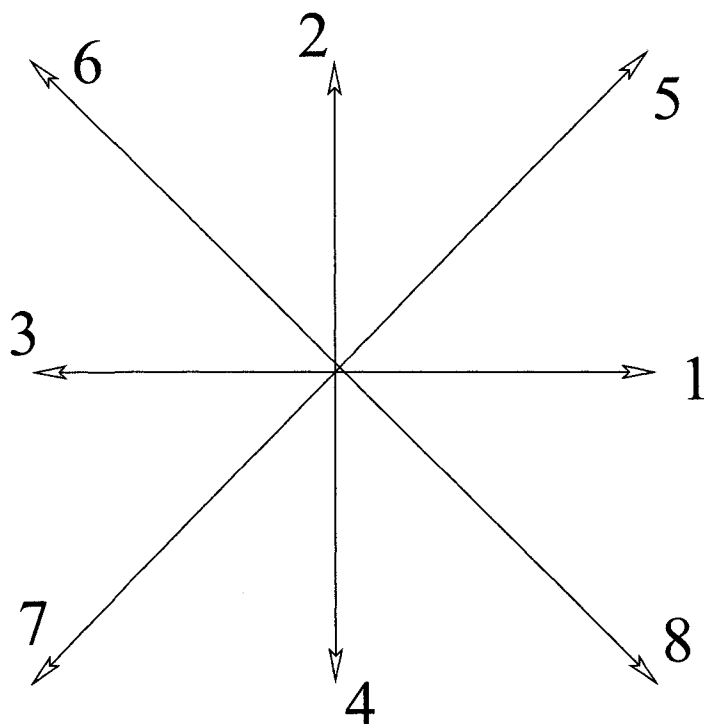


FIGURE 2.2 Modèle coplanaire à 8-vitesses.

Tout modèle en 2D ou 3D qui possède des solutions ne dépendant que d'une seule co-

ordonnée peut être projeté sur cet axe de coordonnée. Il en résulte des modèles 1-D qui satisfont toutes les propriétés sauf celle de conservation d'énergie. Ce sont ces modèles généralisés auxquels nos estimateurs d'erreur s'appliqueront et que nous utiliserons dans la validation numérique au Chapitre 4.

2.1.3 Propriétés héritées de l'équation de Boltzmann

Le modèle discret présente quelques propriétés analogues aux propriétés de l'équation de Boltzmann.

Invariants collisionnels

Une fonction $\phi = \phi(\mathbf{u})$ est un invariant collisionnel si et seulement si

$$\phi(\mathbf{u}_i) + \phi(\mathbf{u}_j) = \phi(\mathbf{u}_k) + \phi(\mathbf{u}_l),$$

pour tous les indices (i, j, k, l) tels que $A_{ij}^{kl} \neq 0$. Les invariants collisionnels typiques sont la masse $(1, 1, \dots, 1) \in \mathbb{R}^p$, les n composantes du moments $(u_{1x_i}, u_{2x_i}, \dots, u_{px_i}) \in \mathbb{R}^p$, $i = 1, \dots, n$ où $(x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^p$ et l'énergie $\frac{1}{2}(u_1^2, u_2^2, \dots, u_p^2) \in \mathbb{R}^p$. À la différence de la théorie cinétique classique, d'autres invariants collisionnels sont possibles (Platkowski and Illner, 1988).

H-Théorème

En définissant la H -fonctionnelle par $H := \sum_i f_i \ln f_i$, on a :

Théorème 2.1.1.

$$\begin{aligned}
\frac{dH}{dt} &\leq 0, \\
\frac{dH}{dt} &= 0 \quad \Leftrightarrow \quad f_i f_j = f_k f_l \quad \forall i, j, k, l \in \{1, \dots, n\}, \\
H &\geq -(n/e),
\end{aligned}$$

e étant la base du logarithme naturel.

L'équilibre thermodynamique du modèle est atteint quand $\frac{dH}{dt} = 0$. Pour la preuve de ce théorème, voir par exemple (Gatignol, 1975), (Cabannes, 1980).

Connexion microscopique-macroscopique

Définition 2.1.2. *Pour une application*

$$\Phi : \mathcal{F} = \{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n\} \rightarrow \mathbb{R}^n$$

avec les coordonnées

$$\Phi_i = \phi(\mathbf{u}_i), \quad i = 1, \dots, n$$

où ϕ est une fonction de \mathcal{F} dans \mathbb{R}^1 , la valeur moyenne de Φ par rapport à un ensemble donné

$$\mathbf{f} := (f_1, \dots, f_n) \in \mathbb{R}_+^n$$

est donnée par

$$\bar{\Phi} := \frac{1}{\rho} \sum_i \Phi_i f_i,$$

où $\rho := \sum_i f_i$ est défini comme la densité spatiale du gaz.

Les moments macroscopiques pour les MVD sont définis comme les valeurs moyennes de certaines applications Φ particulières. On a :

$$\bar{\mathbf{u}} := \frac{1}{\rho} \sum_i f_i \mathbf{u}_i \quad (2.12)$$

$$\mathbf{P} := \sum_i f_i (\mathbf{u}_i - \bar{\mathbf{u}}) \otimes (\mathbf{u}_i - \bar{\mathbf{u}}) \quad (2.13)$$

$$p := \frac{1}{3} \sum_i f_i (\mathbf{u}_i - \bar{\mathbf{u}})^2 \quad (2.14)$$

$$\bar{T} := \frac{1}{3k\rho} \sum_i f_i (\mathbf{u}_i - \bar{\mathbf{u}})^2 \quad (2.15)$$

$$\mathbf{q} := \frac{1}{2} \sum_i f_i (\mathbf{u}_i - \bar{\mathbf{u}})^2 (\mathbf{u}_i - \bar{\mathbf{u}}), \quad (2.16)$$

$$\bar{e} := \frac{1}{2\rho} \sum_i \mathbf{P}_{ii}, \quad (2.17)$$

où $\bar{\mathbf{u}}$ est la vitesse de bloc (ou d'ensemble), \mathbf{P} le tenseur de pression, p la pression hydrodynamique, \bar{T} la température (k étant la constante de Boltzmann), \mathbf{q} le flux thermique et \bar{e} est l'énergie interne.

Il est établi (Platkowski and Illner, 1988) que les valeurs moyennes ci-dessus satisfont les lois de conservation de masse, quantité de mouvement et d'énergie écrites sous la

forme habituelle des équations d'Euler de la dynamique des fluides :

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \bar{\mathbf{u}}) = 0, \quad (2.18)$$

$$\partial_t (\rho \bar{\mathbf{u}}) + \nabla \cdot (\rho \bar{\mathbf{u}} \otimes \bar{\mathbf{u}}) + \mathbf{P} = 0, \quad (2.19)$$

$$\partial_t \left(\frac{3}{2} p + \frac{1}{2} \rho \bar{\mathbf{u}}^2 \right) + \nabla \cdot \left(\frac{3}{2} p \bar{\mathbf{u}} + \frac{1}{2} \rho \bar{\mathbf{u}} \bar{\mathbf{u}}^2 + \bar{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{P} + \mathbf{q} \right) = 0. \quad (2.20)$$

En général, le système d'équations ci-dessus n'est pas fermé au sens que ce sont 5 équations pour 8 variables. Les procédures de fermeture sont en dehors du contexte du présent rapport et nous référons le lecteur aux travaux suivants (Platkowski and Illner, 1988) pour des détails.

Connexion avec l'équation de Boltzmann

La relation des modèles à vitesse discrète à l'équation de Boltzmann peut être vue à deux niveaux. Il serait naturel de se demander pour un MVD donné avec N vitesses dont le vecteur solution est $\mathbf{f}^{(N)}$ et pour \mathbf{f} , la solution de l'équation de Boltzmann, est-ce qu'il est

(a) consistant, i.e. pour toute vitesse \mathbf{u}_i , $\lim_{N \rightarrow \infty} \left| Q(\mathbf{f}, \mathbf{f})(\mathbf{u}_i) - Q_i^{(N)}(\mathbf{f}, \mathbf{f}) \right| = 0$?

(b) convergent, i.e. $\lim_{N \rightarrow \infty} \|\mathbf{f} - \mathbf{f}^{(N)}\| = 0$?

La justification théorique rigoureuse de la relation des modèles à vitesse discrète à l'équation de Boltzmann est une question mathématique importante mais difficile. Cette question est souvent désignée comme l'étude des *limites macroscopiques* des MVD. Les principaux travaux sur la question concernent des MVD particuliers. Par exemple, Buet (Buet, 1996) étudia le MVD formulé par Goldstein *et al.* (Goldstein et al., 1989) et donna un argument heuristique démontrant la consistance. La convergence de solutions du MVD (Goldstein et al., 1989) dans le cas d'espace homogène fut établi par

Palczewsky et Schneider (Palczewski and Schneider, 1998) et pour les solutions en espace non homogène un résultat de convergence fut donné par Mischler (Mischler, 1997). Nous ne présenterons pas ces résultats ici, car ils sont en dehors du contexte de notre rapport. En fait, la littérature est très vaste et technique et il serait difficile d'en donner même un bref sommaire. Pour ce travail, il suffit de remarquer qu'il existe une preuve de la consistance et convergence au sens probabiliste de l'algorithme de Illner-Rjasanow basée sur les MVD vers une solution de l'équation de Boltzmann (Illner and Wagner, 1993).

2.1.4 Solution faible et existence

Nous présentons ici, sans entrer dans les détails, quelques résultats d'existence de solutions pour le problème à vitesse discrète (2.1) dans le cas 1D.

Définition 2.1.3. *On dit que $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_N) \in C([0, T]; (L^1(\mathbb{R}))^N)$ est une solution "douce" de (2.1) pour les conditions initiales $\mathbf{f}_0 \in L^1(\mathbb{R})^N$, si $Q_i(\mathbf{f}, \mathbf{f}) \in L^1(\mathbb{R} \times [0, T])$ et pour $t \in [0, T]$ et presque partout $x \in \mathbb{R}$, $\mathbf{f}(x, t)$ satisfait l'équation intégrale*

$$f_i(x, t) = f_{i0}(x - v_i t) + \int_0^t Q_i(\mathbf{f}, \mathbf{f})(x - v_i(t - \tau), \tau) d\tau, \quad (2.21)$$

pour $i = 1, \dots, N$.

Considérons les hypothèses suivantes sur les coefficients B_i^{kl} (2.8) pour le problème (2.1) en 1-D :

i)

$$B_i^{jk} = B_i^{kj}, \quad (2.22)$$

$$B_i^{jk} \leq 0 \quad \text{si } j = i \text{ ou } k = i, \quad (2.23)$$

$$B_i^{jk} \geq 0 \quad \text{si } j \neq i \text{ et } k \neq i, \quad (2.24)$$

$$|B_i^{jk}| \leq B^*, \quad B^* \text{ une certaine constante positive} \quad (2.25)$$

ii)

$$v_1 < v_2 < \dots < v_N, \quad (2.26)$$

iii) Il existe $\nu_i \geq 1, (i = 1, \dots, N)$ tel que pour j, k fixés,

$$\sum_{i=1}^N \nu_i B_i^{jk} = 0, \quad (2.27)$$

$$\sum_{i=1}^N v_i \nu_i B_i^{jk} = 0, \quad (2.28)$$

iv) Si $B_i^{ii} \leq 0$, alors il existe une suite d'indices $i = i_1, i_2, \dots, i_r$ telle que

$$B_{i_{k+1}}^{i_k i_k} > 0 \quad \text{pour } k = 1, \dots, r-1, \quad (2.29)$$

$$B_{i_r}^{i_r i_r} = 0. \quad (2.30)$$

Toutes les conditions ci-dessus, sauf (iii) et (iv) sont intuitives. Les entiers ν_i de (iii) représentent le nombre de vitesses dans le modèle n-D qui sont projetées sur la même vitesse u_i en 1-D. La condition (iv) est plus technique et provient directement de la projection. Le résultat d'existence globale de base est le suivant

Théorème 2.1.4 ((Beale, 1986), (Bony, 1987)). *Supposons que (2.1) satisfait les hypothèses (i) - (iv) ci-dessus et soit $\mathbf{f}_0 \geq 0$ avec $\mathbf{f}_0 \in (L^1(\mathbb{R}) \cap L_+^\infty(\mathbb{R}))^N$. Alors, il existe*

une unique solution "douce", non négative, de (2.1) avec

$$\mathbf{f} \in C([0, T]; (L^1(\mathbb{R})^N)) \cap (L^\infty(\mathbb{R} \times [0, T])^N) \quad (2.31)$$

pour tout $T > 0$, et $Q_i(\mathbf{f}, \mathbf{f}) \in L^1(\mathbb{R} \times [0, T])$, $i = 1, \dots, N$. De plus, si \mathbf{f}_0 est de classe C^1 , alors \mathbf{f} sera aussi de classe C^1 en (x, t) .

Nous référons le lecteur intéressé aux articles ci-dessus mentionnés pour plus de détails. La définition de solution au sens "doux" est un compromis entre une solution au sens "faible" et une solution au sens "fort". La catégorie générale dans laquelle devrait demeurer ces solutions, particulièrement pour l'équation de Boltzmann, reste un problème ouvert.

2.2 L'algorithme de Illner-Rjasanow

Illner et Rjasanow proposèrent dans (Illner and Rjasanow, 1992) un modèle hybride entre les modèles standards de vitesses discrètes et les techniques *Monte Carlo* de simulation de particules pour l'équation de Boltzmann : le modèle à vitesse discrète aléatoire (MVDA). L'innovation de leur méthode réside dans le fait de subdiviser, de manière aléatoire, l'ensemble des vitesses en plusieurs sous-groupes de 9 vitesses et d'utiliser un algorithme numérique efficace pour traiter les collisions dans chaque sous-ensemble. L'un des avantages de cette technique est que Illner et Wagner (Illner and Wagner, 1993) ont montré qu'elle converge, au sens des probabilités, vers une solution de l'équation de Boltzmann. Un autre avantage de cette méthode est qu'elle est apparentée à la méthode *Stochastic Weighted Particle Method* (SWPM) (Rjasanow and Wagner, 1996a), (Rjasanow and Wagner, 1996b), dont elle est un cas particulier. Cette méthode a été utilisée dans des problèmes industriels et constitue l'une des techniques les plus performantes. Un des objectifs à long terme de ce travail est de contribuer au développement de la

méthode SWPM.

Nous présentons, dans ce mémoire, l'approche originale d'Illner et Rjasanow (Illner and Rjasanow, 1994) pour le cas simple de l'équation de Boltzmann homogène en espace

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{S}^2} q(v, u, e) (f' f'_* - f f_*) d\mathbf{e} du \quad (2.32)$$

$$f(0, v) = f_0(v), \quad (2.33)$$

où la notation usuelle $f = f(t, v)$, $f_* = f(t, v_*)$, $f' = f(t, v')$, $f'_* = f(t, v'_*)$ est utilisée, $q(v, u, e)$ est le noyau de collision. Il est possible d'étendre l'algorithme à l'équation de Boltzmann non-homogène en espace.

Afin de décrire les algorithmes pour ce problème, nous introduisons les concepts suivants, qui ont l'avantage d'être intuitivement transposables en concepts de programmation objet :

Définition 2.2.1. *On appelle X -Espace \mathcal{X} , une discrétisation (partition) du domaine physique Ω . Chaque cellule X de la partition est appelée une X -Cellule.*

Définition 2.2.2. *On appelle V -Espace \mathcal{V} , une discrétisation (partition) du domaine de vitesse \mathbb{R}^3 . Chaque cellule V de la partition est appelée une V -Cellule.*

Par préoccupation d'une implémentation intuitive en programmation orientée objet de ces algorithmes, il s'avère commode de regarder les processus de collision comme des processus de transfert de masse entre pseudo-particules (Illner and Wagner, 1993). Nous formaliserons cette idée en introduisant le concept de P -particule.

Définition 2.2.3. *On appelle P -particule de vitesse \mathbf{v}_i dans une X -Cellule, la paire (\mathbf{v}_i, g_i) à l'instant t , où sa densité $g_i = g_i(t)$ est une fonction du temps.*

Définition 2.2.4. On appelle *P-Cellule* P , tout triplet $(X, \mathcal{V}_X, \mathcal{E}_X)$ formé par une *X-Cellule* X , un *V-Espace* \mathcal{V}_X et un ensemble de *P-particules* $\mathcal{E}_X = \{(\mathbf{v}_1, g_1), \dots, (\mathbf{v}_n, g_n)\}$.

Définition 2.2.5. On appelle *P-Espace* \mathcal{P} , construit à partir du *X-Espace* \mathcal{X} et d'un ensemble de *V-Espace* \mathcal{V}_X , pour $X \in \mathcal{X}$, l'ensemble des *P-Cellule* $\mathcal{P} := \{(X, \mathcal{V}_X, \mathcal{E}_X) \mid X \in \mathcal{X}\}$.

Dans l'algorithme de Illner-Rjasanow, la distribution continue $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ de l'équation de Boltzmann est approximée par

1. une discrétisation de Ω en *X-Espace*,
2. une discrétisation des vitesses dans chaque *X-Cellule*, telle que si $\mathbf{x} \in X$, et la vitesse \mathbf{v}_i appartient à une *V-Cellule* V , alors $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}_i, t)|_{\mathbf{x} \in X} \simeq g_i(t)$.

Plus techniquement, en utilisant les représentations suivantes en structures de données en C++ pour les entités mathématiques *P-Espace* et *P-Cellule* :

```
class PEspace
{
public:
    real    CFL();
    void    init();
    void    collision_operateur( Real dt );
    void    reduction();

private:
    vector<XCellule> xdomaine;
```

```

    vector<PCellule> pdomaine;
}

class PCellule
{
public:
    void collisions_particules( Real dt );

private:
    VEspace    *vdomaine;
    XCellule   *xcell ;
    vector<Particule> ens_particules ;
}

```

l'algorithme de Illner-Rjasanow, écrit en pseudo-code, prend alors la forme suivante :

Algorithme 2.2.1.

```

PEspace  distribution;
distribution.init();
n_iter = 0;
t = 0.0;
while((t < t_final)&&(n_iter < Max_iter))
{
    dt = distribution.CFL();

```

```

distribution.collision_opérateur( dt );
distribution.reduction();

t = t + dt;
n_iter++;
}

```

où les méthodes principales sont : `reduction()`, `collision_opérateur()` et `init()`. La première méthode initialisera le domaine et sera décrite en détail dans la Section 2.2.1. La méthode `collision_opérateur()` sera traitée dans la Section 2.2.2 et `reduction()` dans la section 2.3 Section 2.2.3.

Remarque 2.2.1.

- (a) *L'état du système, à un instant t , est entièrement défini par la donnée de l'ensemble de toutes les P-particules dans toutes les X-Cellules du domaine.*
- (b) *Il est important de distinguer le concept de P-particule d'avec celui de particule physique réel (ou molécule physique réelle). Le premier a une densité uniforme dans une X-Cellule mais la densité du second dépend de chaque point de la X-Cellule.*

Dans le cas homogène que nous décrirons ici, on se limitera à une seule X-Cellule, donc nous ne la mentionnerons pas explicitement.

Si une interaction entre P-particules π_i et π_j dans un espace homogène est décrite symboliquement par

$$\pi_i + \pi_j \rightarrow \pi_i + \pi_j + \pi_k + \pi_l \quad (2.34)$$

alors, au premier ordre, l'évolution des P-particules durant un intervalle de temps Δt est (Illner and Wagner, 1993)

$$\pi_i(t) := (\mathbf{v}_i, g_i(t)), \quad (2.35)$$

$$\pi_j(t) := (\mathbf{v}_j, g_j(t)), \quad (2.36)$$

$$\pi_i(t + \Delta t) := (\mathbf{v}_i, g_i(t + \Delta t)), \quad g_i(t + \Delta t) = g_i(t) - \frac{1}{2}\delta g_{ij}, \quad (2.37)$$

$$\pi_j(t + \Delta t) := (\mathbf{v}_j, g_j(t + \Delta t)), \quad g_j(t + \Delta t) = g_j(t) - \frac{1}{2}\delta g_{ij}, \quad (2.38)$$

$$\pi_k(t + \Delta t) := (\mathbf{v}_k, g_k(t + \Delta t)), \quad g_k(t + \Delta t) = \frac{1}{2}\delta g_{ij}, \quad (2.39)$$

$$\pi_l(t + \Delta t) := (\mathbf{v}_l, g_l(t + \Delta t)), \quad g_l(t + \Delta t) = \frac{1}{2}\delta g_{ij}. \quad (2.40)$$

Comme on peut le remarquer, il y a création de P-particules π_k, π_l et destruction partielle des P-particules π_i, π_j par transfert de masse. Le caractère hybride stochastique-déterministe du modèle vient du fait que

(i) les vitesses post-collisionnelles \mathbf{v}_k et \mathbf{v}_l sont générées stochastiquement, tandis que

(ii) les transferts de masse δg_{ij} sont réalisées de manière déterministe.

En pratique, ceci se traduit par un algorithme en deux étapes. La première, dont nous parlerons en détail dans la Section 2.2.2.1, construit aléatoirement un ensemble de vitesses post-collisionnelles $\mathbf{v}_k, \mathbf{v}_l$ qui définissent les P-particules π_k, π_l . La deuxième étape, décrite dans Section 2.2.2.2, est un calcul déterministe des δg_{ij} (donc g_k, g_l) post-collisionnelles.

Considérons le cas du modèle à vitesse discrète homogène en espace (de type modèle de Broadwell) où trois vitesses pré-collisionnelles $\mathbf{u}_i, i = 1, 2, 3$ sont connues, et six vitesses post-collisionnelles générées aléatoirement $\mathbf{u}_{ij}, i, j = 1, 2, 3, i \neq j$ sont incluses. L'évolution dans le temps des poids correspondants $g_i, i = 1, 2, 3$, et $g_{ij}, i, j = 1, 2, 3, i \neq j$, où $g_{ij}(0) = 0$, est donnée par le système d'équations différentielles non-linéaires

suivant (Illner and Rjasanow, 1994) :

$$\frac{dg_i(t)}{dt} = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^3 (g_{ij}^2(t) - g_i(t)g_j(t)) \quad (2.41)$$

$$\frac{dg_{ij}(t)}{dt} = -\alpha_{ij}(g_{ij}^2(t) - g_i(t)g_j(t)) \quad (2.42)$$

$$g_i(0) = g_i^{(0)} > 0, \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.43)$$

$$g_{ij}(0) = 0, \quad i, j = 1, 2, 3, \quad i \neq j. \quad (2.44)$$

Les paramètres de collisions α_{ij} , $i, j = 1, \dots, n$, $i \neq j$ sont définis par

$$\alpha_{ij} = 4\pi Nq(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j, \mathbf{e}_{ij}), \quad i, j = 1, 2, 3, \quad i \neq j \quad (2.45)$$

$$\alpha_{ij} = \alpha_{ji}, \quad (2.46)$$

où \mathbf{e}_{ij} est un vecteur unitaire sur la sphère unité. La constante de normalisation $4\pi N$ est nécessaire pour la convergence de la méthode. Il est bien connu que ce système a une solution globale non négative. Afin d'assurer que la solution numérique de (2.41) reste positive pour Δt choisi, Illner et Rjasanow utilise une méthode d'Euler implicite; voir Section 2.2.2.2 pour les détails.

2.2.1 Initialisation `distribution.init()`

L'initialisation est réalisée suivant les étapes suivantes :

- (i) Diviser l'espace de vitesse \mathbb{R}^3 en N V-Cellules convexes $C_N(i)$, $i = 1, \dots, N$ et supposer que quand $N \rightarrow \infty$, le maximum des diamètres des cellules finies converge vers zéro (certaines V-Cellules sont de volumes infinis). Le point milieu M de chaque V-Cellule de notre discrétisation est défini selon la donnée de la distribution initiale

$f_0(v)$

$$v_i = \frac{1}{\int_{C_N(i)} f_0(v) dv} \int_{C_N(i)} v f_0(v) dv.$$

(ii) Définir l'ensemble initial des vitesses discrètes : $V(0) = \{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_{N(0)}\}$.

(iii) Associer à chaque vitesse initiale $\mathbf{v}_i, i = 1, \dots, N(0)$, le poids initial $g_i(0)$ donné par

$$g_i(0) = \int_{C_N(i)} f_0(v) dv. \quad (2.47)$$

Si la distribution initiale est non-homogène, pour définir $g_i(0)$ sur une X-Cellule, il suffit de prendre des moyennes sur celle-ci.

2.2.2 La méthode `collision_opérateur()`

Les collisions s'effectuent localement dans chaque P-Cellule de la manière suivante :

```
void PEspace::collision_opérateur( Real dt )
{
    p_iter = pdomaine.begin();
    while( p_iter != pdomaine.end() )
    {
        p_iter++;
        p_iter->collisions_particules( dt )
    }
    end;}

```

La méthode `collisions_particules(Real dt)` (dans le cas non-homogène, elle est ignorante des X-Cellules voisines) est donnée par :

```
void PCellule::collisions_particules( Real dt )
{
    n_particules = ens_particules.size();
    p = permutation(n_particules);
    n_triplet = n_particules/3;

    for (int i=0; i < n_triplet; i++)
    {
        Construire vitesses post-collisionnelles;
        Calculer densités post-collisionnelles;
    }
}
```

2.2.2.1 Vecteurs vitesses post-collisionnelles

À un temps t fixe, la construction stochastique des vitesses post-collisionnelles est réalisée de la manière suivante :

- (i) Partitionner l'ensemble de toutes les P-particules $(\mathbf{v}_i(t), g_i(t))$ en m groupes de 3 P-particules choisies aléatoirement. Naturellement, on doit supposer au départ que $N(t) = 3m$ est un multiple de 3. La partition aléatoire est faite à l'aide d'une permutation de $\{1, \dots, N(t)\}$.
- (ii) Choisir aléatoirement trois paramètres de collisions indépendants et équidistribués

$\mathbf{e}_{ij} \in \mathbb{S}^2$ avec

$$\mathbf{e}_{ij} = \mathbf{e}_{ji}, \quad i, j = 1, 2, 3, \quad i \neq j.$$

Calculer les vitesses post-collisionnelles \mathbf{u}_{ij} et \mathbf{u}_{ji} selon les formules

$$\mathbf{u}_{ij} = \mathbf{u}_i + (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i, \mathbf{e}_{ij})\mathbf{e}_{ij}, \quad (2.48)$$

$$\mathbf{u}_{ji} = \mathbf{u}_j + (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j, \mathbf{e}_{ij})\mathbf{e}_{ij}. \quad i, j = 1, 2, 3, \quad i \neq j, \quad (2.49)$$

Il est bien connu que ces nouvelles vitesses permettront des collisions $(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j) \rightarrow (\mathbf{u}_{ij}, \mathbf{u}_{ji})$ qui conservent la masse, la quantité de mouvement et l'énergie.

2.2.2.2 Densités post-collisionnelles

Chacune des 6 nouvelles vitesses $\mathbf{u}_{ij}, i \neq j$ nécessite maintenant un poids qui peut être obtenu uniquement en diminuant les anciens poids g_i et g_j . L'évolution des poids g_1, \dots, g_3 et $g_{ij}, i, j = 1, \dots, 3, i \neq j$ est donnée par le modèle à vitesse discrète homogène en espace (2.41). Le résultat de l'évolution en temps dans (2.41) pour chaque groupe est le nouvel ensemble $\{(\tilde{\mathbf{u}}_i(t), \tilde{g}_i(t)), i = 1, \dots, 3N(t)\}$ qui contient $3N(t)$ vitesses avec des poids correspondants. On peut remarquer que $g_{ij}(t) = g_{ji}(t), t \geq 0$ car ils occupent les mêmes équations avec les mêmes conditions initiales $g_{ij}(0) = g_{ji}(0) = 0$.

Nous présentons maintenant le schéma utilisé par Illner et Rjasanow pour résoudre les équations du modèle discret (2.41). L'algorithme utilise le schéma implicite d'Euler, qui a l'avantage de garantir la non-négativité de tous les poids pour tout $\Delta t > 0$. Afin de contrôler le nombre total de P-Particules, ils proposent aussi une réduction du nombre de P-Particules qui conserve les trois valeurs macroscopiques : masse, quantité de mouvement et énergie (voir Section 2.2.3). En utilisant les notations suivantes :

$$\mathbf{y}(t) = (g_{12}(t), g_{13}(t), g_{23}(t))^T \in \mathbb{R}^3, \quad (2.50)$$

$$\mathbf{a} = (\alpha_{12}, \alpha_{13}, \alpha_{23})^T \in \mathbb{R}^3, \quad (2.51)$$

$$\mathbf{b} = (g_1^{(0)} g_2^{(0)}, g_1^{(0)} g_3^{(0)}, g_2^{(0)} g_3^{(0)})^T \in \mathbb{R}^3, \quad (2.52)$$

$$F(\mathbf{y}) = (J\mathbf{y}, \mathbf{y}) \in \mathbb{R}, \quad (2.53)$$

$$B = \begin{pmatrix} g_1^{(0)} + g_2^{(0)} & g_2^{(0)} & g_1^{(0)} \\ g_3^{(0)} & g_1^{(0)} + g_3^{(0)} & g_1^{(0)} \\ g_3^{(0)} & g_2^{(0)} & g_2^{(0)} g_3^{(0)} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3 \times 3},$$

avec

$$J = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3 \times 3},$$

l'algorithme de calcul des poids g_i, g_{ij} au temps $t = \tau$ s'écrit

- (i) Étant donnés $\alpha_{12}, \alpha_{13}, \alpha_{23}$ et $g_1^{(0)}, g_2^{(0)}, g_3^{(0)}$, calculer les vecteurs \mathbf{a} et \mathbf{b} et la matrice $I + \tau \text{diag}(\mathbf{a})B$ selon les notations ci-dessus,

- (ii) Résoudre le système linéaire

$$\mathbf{y}(\tau) = \mathbf{a}_1 + F(\mathbf{y}(\tau))\mathbf{a}_2 \quad (2.54)$$

$$\mathbf{a}_1 = \tau(I + \tau \text{diag}(\mathbf{b})B)^{-1} \text{diag}(\mathbf{b}) \quad (2.55)$$

$$\mathbf{a}_2 = \tau(I + \tau \text{diag}(\mathbf{a})B)^{-1} \mathbf{a} \quad (2.56)$$

- (iii) Calculer les valeurs $(J\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_1)$, $(J\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_2)$ et $((J + J^T)\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)$,

(iv) Calculer α selon

$$\alpha = \frac{1 - \left(((J + J^T)\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2) - \sqrt{1 - \left(((J + J^T)\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)^2 - 4(J\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_1)(J\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_2) \right)} \right)}{2(J\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_2)},$$

(v) Calculer $g_{12}(\tau)$, $g_{13}(\tau)$ et $g_{23}(\tau)$ comme

$$(g_{12}(\tau), g_{13}(\tau), g_{23}(\tau)) = \mathbf{a}_1 + \alpha \mathbf{a}_2,$$

(vi) Calculer $(g_1(\tau), g_2(\tau), g_3(\tau))$ à partir de la loi de conservation :

$$g_1(\tau) = g_1^{(0)} - g_{12}(\tau) - g_{13}(\tau) \quad (2.57)$$

$$g_2(\tau) = g_2^{(0)} - g_{12}(\tau) - g_{23}(\tau) \quad (2.58)$$

$$g_3(\tau) = g_3^{(0)} - g_{13}(\tau) - g_{23}(\tau) \quad (2.59)$$

2.2.3 La méthode reduction()

Une des propriétés importantes des MVDA est que le nombre de P-particules croît de manière importante à chaque pas de temps. Il s'avère alors nécessaire de réduire ce nombre. Nous donnerons dans cette section plus de détails concernant l'étape de réduction du nombre de P-particules.

Supposons que les collisions ont évoluées de manière à ce que l'on se retrouve m P-Particules avec des vitesses dans la même V-Cellule, disons la k -ième $C_{N(t)}(k)$. Notre objectif sera de limiter le nombre de vitesses à deux fois le nombre originale de $N(0)$ V-Cellule dans le V-Espace.

– Si $m \leq 2$, alors la réduction n'est pas nécessaire.

– Si $m \geq 3$, les P-particules $(\mathbf{u}_1, g_1), \dots, (\mathbf{u}_m, g_m)$ définissent les moments

$$g = \sum_{i=1}^m g_i, \quad (2.60)$$

$$g\mathbf{u} = \sum_{i=1}^m g_i \mathbf{u}_i, \quad (2.61)$$

$$ge = \sum_{i=1}^m g_i |\mathbf{u}_i|^2, \quad (2.62)$$

qui doivent être conservés. La vitesse moyenne $\mathbf{u} = \frac{1}{g} \sum_{i=1}^m g_i \mathbf{u}_i$, est toujours dans $C_{N(t)}(k)$ parce qu'elle est un élément de la fermeture convexe de l'ensemble de vitesse $\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m\}$.

Considérons maintenant deux P-particules (\mathbf{v}_1, s_1) et (\mathbf{v}_2, s_2) définies par

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{u} - \alpha_1 \mathbf{n}, \quad (2.63)$$

$$\mathbf{v}_2 = \mathbf{u} + \alpha_2 \mathbf{n}, \quad (2.64)$$

$$s_1 + s_2 = g, \quad (2.65)$$

$$s_1 \mathbf{v}_1 + s_2 \mathbf{v}_2 = g\mathbf{u}, \quad (2.66)$$

$$s_1 |\mathbf{v}_1|^2 + s_2 |\mathbf{v}_2|^2 = ge \quad (2.67)$$

où $\mathbf{n} \in \mathbb{S}^2$ est un vecteur arbitraire. Notre objectif sera de remplacer les $m \geq 0$ particules par ces 2 P-Particules de façon à conserver la masse, la quantité de mouvement et l'énergie. Nous avons maintenant quatre paramètres libres $\alpha_1, \alpha_2, s_1, s_2$ pour atteindre ce but. On obtient :

$$s_1 + s_2 = g, \quad (2.68)$$

$$s_1 \alpha_1 = s_2 \alpha_2, \quad (2.69)$$

$$s_1 \alpha_1^2 + s_2 \alpha_2^2 = g(e - |\mathbf{u}|^2). \quad (2.70)$$

Le choix le plus simple est bien sûr (Illner and Rjasanow, 1994)

$$s_1 = s_2 = g/2, \quad (2.71)$$

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \sqrt{e - |\mathbf{u}|^2}. \quad (2.72)$$

Même si ces nouvelles vitesses n'appartiennent pas à la V-cellule, il reste que l'algorithme appliqué successivement à toutes les particules générera au plus $2N(0)$ vitesses, c'est à dire deux fois le nombre de V-Cellules dans le V-Espace.

2.3 Schéma pour le problème non-homogène

Le problème homogène en espace a été traité dans la section précédente par l'approche proposée par Illner et Rjasanow (Illner and Rjasanow, 1994). On s'intéresse ici au cas de l'équation dépendant de l'espace,

$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{f} = Q(\mathbf{f}, \mathbf{f}), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (2.73)$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, 0) = \mathbf{f}_0(\mathbf{x}, \mathbf{v}), \quad \mathbf{x} \in \Omega,$$

$$C.F, \quad (x, t) \in \partial\Omega \times (0, T)$$

pour un domaine d'espace $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ et $t \in I = (0, T)$, basé sur le modèle aléatoire à vitesses discrètes. Les conditions aux frontières $C.F$ seront précisées dans la Section 2.3.2.3. Nous nous intéresserons ici au cas transitoire. L'objectif de ce chapitre est de présenter un schéma d'approximation numérique par les modèles à vitesses discrètes pour le problème dépendant de l'espace de type (2.73). Le choix de discrétisation de l'espace de phase est d'abord décrit dans la section suivante, puis nous présentons brièvement la méthode numérique basée sur le *splitting* d'opérateur, et enfin notre modèle adaptatif sera formulé.

2.3.1 Discrétisation de l'espace de phase

L'espace des phases associé au problème de Boltzmann est un continuum. Les modèles à vitesses discrètes permettent de travailler dans un espace discret. Nous proposons quelques définitions.

Définition 2.3.1. On dit qu'un V -Espace \mathcal{V}_2 est une subdivision dans un V -Espace \mathcal{V}_1 (on écrit V -Espace $\mathcal{V}_1 \subset \mathcal{V}_2$), si $\forall V_1 \in \mathcal{V}_1, \exists V_{2j}, \dots, V_{2k} \in \mathcal{V}_2$ tels que

$$\bar{V}_1 = \bigcup_{i=1}^k \bar{V}_{2i}, \text{ mais } \bar{V}_{2i} \cap \bar{V}_{2j} = \emptyset, i \neq j.$$

On dira alors que \mathcal{V}_2 est plus fin que \mathcal{V}_1 (ou \mathcal{V}_1 est plus grossier que \mathcal{V}_2).

Définition 2.3.2. Un P -Espace adaptatif sur un X -Espace \mathcal{X} et une suite de V -Espace $\mathcal{V}_1 \subset \mathcal{V}_2 \subset \dots \mathcal{V}_n$, est un ensemble de P -Cellules $P := \{(X, \mathcal{V}_{i(X)}) \mid \forall X \in \mathcal{X}, i(X) \in \{1, \dots, n\}\}$.

L'idée de notre approche est résumée dans l'énoncé suivant :

Énoncé 2.3.3. Soit X un $XEspace$ et V un $VEspace$. Alors une approximation \mathbf{f}_{approx} par modèle de vitesses discrètes de f solution de (2.73) est donnée par la suite des $\mathbf{f}^{X_i} := \mathbf{f}_{approx}|_{X_i}$ où $f_k^{X_i} := f^{X_i}(x, v_k)$ est homogène en espace sur la $XCellule$ X_i .

Le calcul se fait en deux étapes : un calcul sur V -Espace pour collision, suivi (puis) un calcul sur X -Espace pour transport. Illner et Rjasanow ont choisi un seul P -Espace et leur calcul est dans V -Espace uniquement. Mais à la différence d'eux, nous travaillons avec des P -Espaces adaptatifs. Nous allons utiliser un estimateur d'erreur *a posteriori* pour raffiner localement notre espace de vitesse. Nous décrivons dans la section suivante une méthode de construction des \mathbf{f}^{X_i} .

2.3.2 Méthode de *Splitting* d'opérateur

Discretisons le temps en valeurs discrètes t^n , et désignons par $f_i^n(x, v_i)$ une approximation de la fonction de distribution $f(t^n, x, v_i)$. Une méthode simple de *splitting* en temps du premier ordre pour (2.73) est obtenue en considérant dans un petit intervalle de temps (t^n, t^{n+1}) , $t^{n+1} - t^n = \Delta t$, la solution numérique de l'étape de collision 'homogène en espace' dans chaque XCellule X_i

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial t}(x, t) &= Q_n(\tilde{f}, \tilde{f}), \\ \tilde{f}(x, t) &= f(x, t), \end{aligned} \right\} \quad (2.74)$$

et l'étape de transport dans l'espace entier X

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t}(x, t) + v_n \frac{\partial f}{\partial x}(x, t) &= 0, \\ f(x, t) &= \tilde{f}(x, t + \Delta t), \end{aligned} \right\} \quad (2.75)$$

Remarquons que la condition initiale de l'étape de transport est prise égale à la solution de l'étape de collision (en $t + \Delta t$). L'onde de densité est transporté dans tout l'espace, et les collisions de particules sont effectuées localement dans chaque XCellule. On peut écrire formellement

$$\tilde{f}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t + \Delta t) = C_{\Delta t} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t), \quad (2.76)$$

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t + \Delta t) = T_{\Delta t} \tilde{f}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t + \Delta t), \quad (2.77)$$

où $T_{\Delta t}$ et $C_{\Delta t}$ sont les opérateurs-solutions correspondant respectivement à l'étape de transport et à l'étape de collision. La valeur approximative au temps t^{n+1} est alors donnée par :

$$f^{n+1} = f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t + \Delta t) = T_{\Delta t} \circ C_{\Delta t} f^n, \quad (2.78)$$

Mentionnons, à titre indicatif, que Strang (Strang, 1968) a démontré que la symétrisation du schéma (2.78) :

$$\mathbf{f}^{n+1} = \mathcal{C}_{\Delta t/2} \circ \mathcal{T}_{\Delta t} \circ \mathcal{C}_{\Delta t/2} \mathbf{f}^n, \quad (2.79)$$

permet d'obtenir une discrétisation d'ordre 2, pourvu que chaque étape est résolue avec une méthode au moins du deuxième ordre de précision en temps. Dans le cadre de nos travaux, nous utiliserons uniquement l'approximation (2.78). Nous discutons des méthodes numériques pour les étapes de transport et de collision dans les sous-sections suivantes.

2.3.2.1 Splitting de l'opérateur de transport \mathcal{T}

Le problème de transport (2.75) dans \mathbb{R}^3 peut être écrit en utilisant une forme d'opérateur différentiel

$$\frac{\partial f}{\partial t}(x, t) + Lf(x, t) = 0, \quad L = L_1 + L_2 + L_3, \quad (2.80)$$

où $L_i = v_i \frac{\partial}{\partial x_i}$, x_i désigne la coordonnée dans la direction i . En suivant l'idée de la méthode de splitting, (2.80) est remplacée par le système d'équations (2.81), (2.82),

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial f^1}{\partial t} + v_1 \frac{\partial f^1}{\partial x_1} &= 0, \\ f^1(\mathbf{x}, t = n\Delta t) &= f(\mathbf{x}, t = (n-1)\Delta t), \end{aligned} \right\} \quad (2.81)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial f^i}{\partial t} + v_i \frac{\partial f^i}{\partial x_i} &= 0, \\ f^i(\mathbf{x}, t = n\Delta t) &= f^{i-1}(\mathbf{x}, t = n\Delta t), \end{aligned} \right\} i = 2, 3 \quad (2.82)$$

résolu de 'manière séparée', le résultat de l'une de ces équations étant utilisé comme condition initiale pour la suivante. La solution s'écrit formellement comme dans (2.78)

$$\mathcal{T} = \mathcal{T}_t^{x_3} \circ \mathcal{T}_t^{x_2} \circ \mathcal{T}_t^{x_1}. \quad (2.83)$$

Afin d'utiliser ce 'splitting' dans une méthode numérique, nous remplaçons simplement les opérateur-solutions exacte $\mathcal{T}_t^{x_i}$ par les approximations

$$\mathcal{T}_{\Delta t}^{x_i} \simeq \mathcal{H}_{\Delta t}^{x_i}. \quad (2.84)$$

Mentionnons que si les $\mathcal{H}_{\Delta t}^{x_i}$, $i = 1, 2, 3$, représentent tous des approximations d'ordre p , alors la méthode de splitting (2.83) sera aussi précise d'ordre p pour le problème scalaire linéaire, puisqu'il n'y a pas d'erreur de 'splitting' introduite.

Nous utiliserons le schéma *upwind* pour résoudre numériquement chacune des équations (2.81), (2.82), qui ont la forme d'une équation d'advection linéaire 1D du type :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} u(x, t) + a \frac{\partial u}{\partial z}(u(x, t)) &= 0, \\ u(x, t = 0) &= u_0(x), \end{aligned} \quad (2.85)$$

où a est une constante. Pour une discrétisation d'espace $\{x_i\}_{i=1, \dots, M}$, le schéma *upwind*, du premier ordre pour le problème de type (2.85), s'écrit

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + a \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x} = 0, \quad (2.86)$$

où $u_i^n = u(x_i, t_n)$. Ce qui peut se réécrire

$$u_i^{n+1} = u_i^n \left(1 - a \frac{\Delta t}{\Delta x}\right) + a \frac{\Delta t}{\Delta x} u_{i-1}^n, \quad (2.87)$$

ou encore sous forme vectorielle

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathcal{H}_{\Delta t}^x \mathbf{U}^n, \quad (2.88)$$

où $\mathbf{U}^n = (u_1^n, u_2^n, \dots, u_M^n)^T$ et $\mathcal{H}_{\Delta t}^x$ l'opérateur discret. Des conditions de 'superposition', on a : $u_{i-1}^n = 0$, et alors le schéma (2.87) devient

$$u_i^{n+1} = u_i^n \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} a\right). \quad (2.89)$$

2.3.2.2 Opérateur de collision \mathcal{C}

L'étape de collision (2.74) est un problème *homogène en espace* sur chaque X-Cellule pour lequel nous utiliserons l'algorithme de Illner-Rjasanow (Illner and Rjasanow, 1994) tel que décrit dans le chapitre 2 et auquel nous appliquerons les conditions aux frontières appropriées. L'approximation de collision est traitée sur chaque XCellule $X_j, j = 1, \dots, M_{XCell}$ les unes indépendamment des autres.

2.3.2.3 Conditions initiales et aux frontières

2.4 Adaptivité

L'originalité de notre recherche réside dans cette section décrivant le modèle adaptatif à vitesses discrètes. Bien qu'il existe des techniques simples pour adapter la discrétisation de l'espace de vitesses dans des algorithmes spectraux, nous ne connaissons pas d'autres travaux qui offrent une manière rigoureuse d'adapter la discrétisation de l'espace des vitesses pour les modèles à vitesses discrètes.

2.4.1 Raffinement et Déraffinement

Pour les besoins de notre implémentation, nous introduirons un certain nombre de définitions utiles.

Définition 2.4.1. *On appellera opération de raffinement ('refinement') d'un V-Espace \mathcal{V}_1 l'opération qui consiste à le remplacer par un V-Espace \mathcal{V}_2 plus fin, $\mathcal{V}_1 \subset \mathcal{V}_2$. Par exemple en augmentant le nombre de cellules $M' = 2^d M$ où d est la dimension de l'espace.*

Définition 2.4.2. *On appellera opération de déraffinement ('coarsening'), l'opération inverse i.e qui consiste à remplacer un V-Espace par un V-Espace plus grossier.*

Ces deux types d'opérations seront appliquées lors de l'étape d'adaptation dans l'algorithme.

2.4.2 Algorithmes

L'algorithme général pour le modèle est défini dans le code suivant :

```
#include "TypeDef.h"
#include "Parametres.h"
#include "PEspace.h"

//! Fonction main

int main(int argc, char *argv[])
{
    int n_iter = 0;
```

```

PEspace          distribution(argc, argv);
Parametres_Temps *temps = &(amp;distribution.para.temps);

distribution.print( n_iter );

while((temps->present < temps->final)&&(n_iter < Max_iter))
{
temps->dt = distribution.CFL();

distribution.collision_operateur();
distribution.transport_operateur();
    distribution.transport_operateur_split();
    distribution.reduction();

temps->present += temps->dt;
n_iter++;
distribution.print( n_iter );
}
return 0;
}

```

Nous allons maintenant porter notre attention sur l' étape *Collision/Adaptation*, dans la boucle de pas de temps, qui est le 'coeur' du modèle adaptatif.

2.4.3 Collision-Adaptation

L'algorithme pour cette étape est donné par

Algorithme 2.4.1.

Given : $TOL > 0$, Tolérance adaptative

$\{X_{MX}, V_{MV}\}$, Maillage initial

Δt_k , calculé au k -ième pas de temps

Begin

Calculer $TOL_k = (\frac{\Delta t_k}{T_{final}}) \times TOL$: Tolérance au k -ième pas de temps

For $i = 1, \dots, NbreXCellules$

Calculer $TOL_{k,i} = TOL_k \times \frac{VolumeCelluleX_i}{VolumeEntier}$;

Calculer f_{approx} spatialement homogène pour chaque XCellule X_i de X_{MX} ;

Calculer estimation d'erreur (Cellule $X_i \in X_{MX}$) : $\eta = \eta_i$;

If $\eta > TOL_{k,i}$;

Raffiner ;

Else If $\eta < TOL_{k,i}/10$;

Déraffiner ;

End If ;

End For ;

End ;

Remarquons que l'itération adaptative peut être terminée (ou arrêtée) si le nombre total d'éléments excède un maximum spécifié ou si le temps courant (ou le pas de temps courant) est hors d'un intervalle de temps spécifié.

Comme on peut le remarquer, l'algorithme adaptatif utilise un estimateur d'erreur. Nous proposerons, dans le chapitre suivant, la construction rigoureuse d'un estimateur d'erreur a posteriori.

CHAPITRE 3

ESTIMATION D'ERREUR A POSTERIORI DANS L^1 ENTRE DEUX MODÈLES À VÉLOCITÉ DISCRÈTE

3.1 Formulation du problème

Notre objectif est de mesurer la différence dans $L^1(\mathbb{R})$ entre les solutions $f_n(x, t)$ et $\bar{f}_m(x, t)$ de deux modèles à vitesses discrètes :

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial f_n}{\partial t}(x, t) + v_n \frac{\partial f_n}{\partial x}(x, t) &= \sum_{i,j=1}^N B_n^{ij} f_i(x, t) f_j(x, t), \\ f_n(x, 0) &= f_{n,0}(x), \end{aligned} \right\} n = 1, \dots, N \quad (3.1)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \bar{f}_m}{\partial t}(x, t) + \bar{v}_m \frac{\partial \bar{f}_m}{\partial x}(x, t) &= \sum_{i,j=1}^{\bar{N}} \bar{B}_m^{ij} \bar{f}_i(x, t) \bar{f}_j(x, t), \\ \bar{f}_m(x, 0) &= \bar{f}_{m,0}(x), \end{aligned} \right\} m = 1, \dots, \bar{N} \quad (3.2)$$

Ci-dessus, $f_n(x, t)$ et $\bar{f}_m(x, t)$ représentent la densité des particules avec vitesse v_n à la position $x \in \mathbb{R}$ au temps t , et les fonctions $f_{n,0}(x)$ et $\bar{f}_{m,0}(x)$ représentent les distributions initiales. Les particules de type n se déplacent à une vitesse constante v_n, \bar{v}_n et possèdent une masse $\nu_n, \bar{\nu}_n$ et les constantes B_n^{ij}, \bar{B}_m^{ij} déterminent les taux de production de particules de type n ou m suite à la collision de particules de type (i, j) . Intuitivement, le modèle (3.1) représentera un modèle approximatif de la dynamique d'un gaz raréfié et le modèle (3.2) représentera un modèle plus précis qui tient compte d'un plus grand nombre de collisions possibles, et donc modélise mieux la dynamique du gaz ($\bar{N} \geq N$). Nous référons le lecteur à la Section 2.1.4 pour connaître les conditions imposées sur B_n^{ij} et \bar{B}_m^{ij} . On rappelle au lecteur que ces conditions sur les systèmes hyperboliques (3.1) et (3.2) impliquent l'existence de solutions faibles, au sens donné dans la Section 2.1.4.

Dans la suite, nous utiliserons les notations suivante pour le noyau de collision

$$Q_n(\mathbf{f})(x, t) := \sum_{i,j=1}^N B_n^{ij} f_i(x, t) f_j(x, t)$$

$$\bar{Q}_n(\bar{\mathbf{f}})(x, t) := \sum_{i,j=1}^{\bar{N}} \bar{B}_n^{ij} \bar{f}_i(x, t) \bar{f}_j(x, t),$$

où \mathbf{f} et $\bar{\mathbf{f}}$ sont les vecteurs colonnes formés des inconnues f_n et \bar{f}_m . La forme compacte de l'opérateur de collision $Q_n(\mathbf{f})$ et $\bar{Q}_n(\bar{\mathbf{f}})$ en terme des constantes B_i^{jk} et \bar{B}_i^{jk} sera pratique durant la démonstration du Théorème 3.2.3.

Pour simplifier le reste de notre présentation, nous nous servirons des notations

$$D_1 = \{1, \dots, N\} \times \{1, \dots, N\},$$

$$D_2 = \{N + 1, \dots, \bar{N}\} \times \{1, \dots, N\},$$

$$D_3 = \{1, \dots, N\} \times \{N + 1, \dots, \bar{N}\},$$

$$D_4 = \{N + 1, \dots, \bar{N}\} \times \{N + 1, \dots, \bar{N}\},$$

$$D_k^* = \{(i, j) \in D_k : i \neq j\},$$

et les indices de sommation seront abrégée de la manière suivante :

$$\sum_{D_k} (\cdot) := \sum_{(m,n) \in D_k} (\cdot).$$

Nous désignerons par \mathcal{V} l'ensemble des vitesses autorisées pour le modèle (3.1), $\mathcal{V} = \{v_1, \dots, v_N\}$, et $\bar{\mathcal{V}}$ l'ensemble *étendu* de vitesses, $\bar{\mathcal{V}} = \{\bar{v}_1, \dots, \bar{v}_{\bar{N}}\}$. Les seules hypothèses de comptabilités que nous utiliserons dans notre estimé sont contenus dans la définition suivante.

Définition 3.1.1. *On dit que deux modèles à vitesses discrètes sont compatibles si $N \leq \bar{N}$ et $v_n = \bar{v}_n$, $\nu_n = \bar{\nu}_n$ pour $n = 1, \dots, N$. On dira que ce modèle est non-trivial*

si $N < \bar{N}$ et il existe au moins une $\bar{B}_k^{ij} \neq 0$ quand $(i, j) \in \{1, \dots, N\}^2$ mais $k \in \{N + 1, \dots, \bar{N}\}$.

De la Définition 3.1.1 de compatibilité des vitesses, on a $\mathcal{V} \subset \bar{\mathcal{V}}$.

Dans la section 3.3, nous verrons qu'il existe des modèles satisfaisant ces conditions minimales. Nous verrons, qu'en fait, il est possible de construire \bar{B}_k^{ij} comme une déformation continue de B_k^{ij} . Nous ne sommes pas au courant de l'apparition de cette définition de *compatibilité de MVD* dans les travaux d'autres auteurs, mais étant donné sa simplicité, cette notion pourrait avoir apparu dans la littérature.

L'objectif de ce chapitre sera donc de comparer la distribution f_n à la distribution plus précise \bar{f}_m . Dans la section 3.2, nous présenterons le théorème et sa preuve, du moins en prenant pour acquis trois identités techniques reléguées dans l'annexe I.1. Dans la section 3.3 nous montrerons l'existence d'une très grande famille de paires de modèles compatibles.

3.2 Stabilité, estimation d'erreurs et fonctionnelles

Dans cette section, nous introduirons des fonctionnelles non linéaires, équivalentes à la norme L^1 , qui ont été utilisées dans des travaux précédents pour contrôler la stabilité de solutions différentes émanant *du même modèle*. Nous ferons d'abord un sommaire de certains résultats importants disponibles dans la littérature avant d'introduire de nouvelles définitions qui nous permettront de traiter la stabilité entre deux solutions *de modèles différents*.

Dans ces travaux originaux sur la stabilité d'un modèle à vitesses discrètes, Bony (Bony,

1987) a introduit la fonctionnelle non linéaire :

$$\begin{aligned}
\mathcal{Q}_B(t) &= \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \operatorname{sgn}(y-x)(v_m - v_n) \nu_m \nu_n |f_m(x)| |f_n(y)| dx dy \\
&= \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N \left[\int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \mathbb{1}_{x < y} (v_m - v_n) \nu_m \nu_n |f_m(x)| |f_n(y)| dx dy \right. \\
&\quad \left. - \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \mathbb{1}_{x > y} (v_m - v_n) \nu_m \nu_n |f_m(x)| |f_n(y)| dx dy \right] \\
&=: \mathcal{Q}_B^{(1)} + \mathcal{Q}_B^{(2)}
\end{aligned} \tag{3.3}$$

où $\operatorname{sgn}(x)$ égale -1 pour $x < 0$, 0 pour $x = 0$ et $+1$ pour $x > 0$. Remarquons que pour m, n tel que $m > n$, $\mathcal{Q}_B^{(1)}$ et $\mathcal{Q}_B^{(2)}$ désignent les potentiels d'interaction respectivement, "avant" et "arrière", entre les ondes de vitesses v_m et v_n . Pour simplifier les notations, nous écrirons pour la suite de ce texte : $f(x, t) \equiv f(x)$. Bony (Bony, 1987) définit une quantité de production instantanée d'interaction $\Lambda(f)$ par :

$$\Lambda(f)(t) = \sum_{\substack{m, n=1 \\ m > n}}^N \int_{\mathbb{R}} \nu_m \nu_n f_m(x) f_n(x) dx \tag{3.4}$$

et établit la proposition suivante, montrant l'uniforme intégrabilité des termes transverses de la source.

Théorème 3.2.1. (Bony, 1987) *Supposons que (3.1) satisfait les hypothèses (2.22)-(2.28), et soit \mathbf{f} , une solution provenant de la donnée initiale \mathbf{f}_0 . Alors*

$$\frac{d\mathcal{Q}_B(t)}{dt} \leq -4v_*^2 \Lambda(f)(t), \tag{3.5}$$

où $v_*^2 = \min_{m \neq n} (v_m - v_n)^2$.

Ha et Tzavaras (Ha and Tzavaras, 2003), qui eux-même ont été influencés par les travaux de Glimm (Glimm, 1965), Bony (Bony, 1987) et Liu-Yang (Liu and Yang, 1999), ont

introduit les fonctionnelles non linéaires $\mathcal{L}_{HT}(t)$ et $\mathcal{Q}_{HT}(t)$ et $\mathcal{H}_{HT}(t)$ suivantes :

$$\mathcal{L}_{HT}(t) := \sum_{m=1}^N \int_{\mathbb{R}} \nu_m |f_m(x, t) - \bar{f}_m(x, t)| dx, \quad (3.6)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_{HT}(t) := \sum_{(m,n) \in D_1} \int_{\mathbb{R}^2} \text{sgn}(y-x)(v_m - v_n) \nu_m \nu_n \times \\ |f_m(x) - \bar{f}_m(x)| (f_n(y) + \bar{f}_n(y)) dx dy \end{aligned} \quad (3.7)$$

$$\mathcal{H}_{HT}(t) := \mathcal{L}_{HT}(t) + K \mathcal{Q}_{HT}(t), \quad (3.8)$$

où la constante positive $K > 0$ est à choisir. Les fonctions f et \bar{f} désignent deux solutions "faibles" de problème (3.1) répondant aux données initiales f_0 et \bar{f}_0 respectivement. $\mathcal{L}_{HT}(t)$ mesure la distance L^1 entre f et \bar{f} , tandis que $\mathcal{Q}_{HT}(t)$ constitue une généralisation de la fonctionnelle $\mathcal{Q}_B(t)$ de Bony. $\mathcal{Q}_{HT}(t)$ mesure les potentiels d'interaction "vers l'avant" et "vers l'arrière" entre l'onde de densité f_i et la pseudo-onde $|f_i - \bar{f}_i|$ et entre l'onde de densité \bar{f}_i et $|f - \bar{f}_i|$. Introduisons la notation, $\delta_i(x, t) = \text{sgn}(f_i(x, t) - \bar{f}_i(x, t))$. En utilisant des analogues de quantités de production instantanée d'interaction $\Lambda(f)(t)$ de la forme (Ha and Tzavaras, 2003),

$$\Lambda_d(f, \bar{f})(t) := \sum_{(m,n) \in D_1^*} \int_{\mathbb{R}} \nu_m \nu_n |f_m - \bar{f}_m|(x) (f_n + \bar{f}_n)(x) dx, \quad (3.9)$$

$$\Lambda_s(f, \bar{f})(t) := \sum_{(m,n) \in D_1^*} \int_{\mathbb{R}} \nu_m B_m^{nn} \left(1 - \frac{\delta_m}{\delta_n}\right) |f_n - \bar{f}_n|(x) (f_n + \bar{f}_n)(x) dx, \quad (3.10)$$

$$\Lambda(f, \bar{f})(t) := \Lambda(f, \bar{f})_d(t) + \Lambda(f, \bar{f})_s(t) \quad (3.11)$$

Ha et Tzavaras établissent le résultat suivant d'analyse de $L^1(\mathbb{R})$ stabilité pour le problème (1) :

Théorème 3.2.2. (Ha and Tzavaras, 2003) *Supposons que (3.1) satisfait (2.22)-(2.28). Soient f et \bar{f} deux solutions de (1) correspondant, respectivement, aux données initiales f_0 et \bar{f}_0 avec $\|f_0\|_{L^1(\mathbb{R})} + \|\bar{f}_0\|_{L^1(\mathbb{R})} \ll 1$. Alors, pour un choix approprié de K , la fonc-*

tionnelle $\mathcal{H}_{HT}(t)$ est équivalente à la L^1 -distance entre \mathbf{f} et $\bar{\mathbf{f}}$ et satisfait

$$\begin{aligned}\frac{d\mathcal{L}_{HT}(t)}{dt} + \Lambda_s(f, \bar{f})(t) &\leq C_1 \Lambda_d(f, \bar{f})(t), \\ \frac{d\mathcal{Q}_{HT}(t)}{dt} + c_2 \Lambda_d(f, \bar{f})(t) &\leq C_2 \left(\|f\|_{L^1(\mathbb{R})} + \|\bar{f}\|_{L^1(\mathbb{R})} \right) \Lambda(f, \bar{f})(t), \\ \frac{d\mathcal{H}_{HT}(t)}{dt} &\leq -c_3 \Lambda(f, \bar{f})(t).\end{aligned}$$

où C_1, C_2, c_2 et c_3 sont des constantes positives indépendantes du temps.

En analogie avec les définitions (3.6), (3.7) et (3.8) des idées de Ha et Tzavaras (Ha and Tzavaras, 2003), nous proposons d'étudier les fonctionnelles non linéaires $\mathcal{L}(t)$ et $\mathcal{Q}(t)$ suivantes :

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(t) &:= \mathcal{L}_1(t) + \mathcal{L}_2(t) \\ &= \sum_{m=1}^N \int_{\mathbb{R}} \nu_m |f_m(x, t) - \bar{f}_m(x, t)| dx + \sum_{m=N+1}^{\bar{N}} \int_{\mathbb{R}} \bar{\nu}_m |\bar{f}_m(x, t)| dx,\end{aligned}\quad (3.12)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{Q}(t) &:= \sum_{(m,n) \in D} \int_{\mathbb{R}^2} \text{sgn}(y-x) (\bar{\nu}_m - \bar{\nu}_n) \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n \times \\ &\quad |f_m(x) - \bar{f}_m(x)| (f_n(y) + \bar{f}_n(y)) dx dy.\end{aligned}\quad (3.13)$$

Enfin pour une certaine constante positive $M > 0$, nous regarderons la fonctionnelle

$$\mathcal{H}(t) := \mathcal{L}(t) + M\mathcal{Q}(t), \quad (3.14)$$

qui est équivalente à la norme $L^1(\mathbb{R})$, $\|\mathbf{f}(\cdot, t) - \bar{\mathbf{f}}(\cdot, t)\|_{L^1(\mathbb{R})}$.

Les résultats précédents indiquent qu'il y a un équilibre entre l'augmentation de la fonctionnelle \mathcal{L}_H et la perte du potentiel d'interaction \mathcal{Q}_H . Nous tenterons de montrer des résultats semblables pour nos fonctionnelles (3.12) et (3.13), mais en se permettant de

ne pas contrôler le résidu de la solution approximative, définit par la substitution de la solution approximative dans l'équation exacte (3.2), comme suit :

$$\begin{aligned} R_m(\mathbf{f}) &:= \partial_t f_m + \bar{v}_m \partial_x f_m - \bar{Q}_m(\mathbf{f}) = Q_m(\mathbf{f}) - \bar{Q}_m(\mathbf{f}), & m = 1, \dots, N, \\ R_m(\mathbf{f}) &:= -\bar{Q}_m(\mathbf{f}), & m = N+1, \dots, \bar{N}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Nous définirons $f_i = 0$ pour $i \in \{N+1, \dots, \bar{N}\}$, et alors

$$R_m(\mathbf{f}) = - \sum_{(i,j) \in D} \bar{B}_m^{ij} f_i f_j, \quad m = N+1, \dots, \bar{N}.$$

Des fois, il sera utile de poser $Q_k(\mathbf{f}) = 0$ quand $k \in \{N+1, \dots, \bar{N}\}$.

Dans nos calculs concernant l'étude des variations des fonctionnelles non linéaires \mathcal{L} , \mathcal{Q} , et \mathcal{H} en fonction du temps, nous utiliserons des analogues des coefficients de production d'interaction tels que introduits par Bony (Bony, 1987) (et repris par Ha et Tzavaras (Ha and Tzavaras, 2003)) qui auront, dans notre contexte, la forme suivante :

$$\Lambda_1(\mathbf{f}, \bar{\mathbf{f}})(t) := \sum_{(m,n) \in D^*} \int_{\mathbb{R}} \bar{v}_m \bar{v}_n |f_m - \bar{f}_m|(x) (f_n + \bar{f}_n)(x) dx, \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned} \Lambda_2(\mathbf{f}, \bar{\mathbf{f}})(t) &:= \sum_{(m,n) \in D^*} \int_{\mathbb{R}} \bar{v}_m \bar{B}_m^{nn} \left(1 - \frac{\delta_m}{\delta_n}\right) \times \\ &\quad |f_n - \bar{f}_n|(x) (f_n + \bar{f}_n)(x) dx, \end{aligned} \quad (3.17)$$

$$\Lambda(\mathbf{f}, \bar{\mathbf{f}})(t) := \Lambda_1(\mathbf{f}, \bar{\mathbf{f}})(t) + \Lambda_2(\mathbf{f}, \bar{\mathbf{f}})(t) \quad (3.18)$$

où $f_k = 0$ pour $k \in \{N+1, \dots, \bar{N}\}$.

L'objectif principal de cet chapitre est de démontrer le théorème suivant qui est une généralisation des Théorème 3.2.1 et Théorème 3.2.2 :

Théorème 3.2.3. *Supposons que (3.1) et (3.2) vérifient les hypothèses (2.22) - (2.28)*

et soient $\mathbf{f}, \bar{\mathbf{f}}$ les solutions des équations (3.1) et (3.2) pour les données initiales $\mathbf{f}_0, \bar{\mathbf{f}}_0$, avec $\|\mathbf{f}_0\|_{L^1(\mathbb{R})} + \|\bar{\mathbf{f}}_0\|_{L^1(\mathbb{R})} \ll 1$. Alors, pour un choix approprié de M dans (3.14), la fonctionnelle $\mathcal{H}(t)$ est décroissante, et on a :

$$\frac{d\mathcal{L}(t)}{dt} + \Lambda_2 \leq C_1\Lambda_1 + \mathcal{R}(\mathbf{f}), \quad (3.19)$$

$$\frac{d\mathcal{Q}(t)}{dt} + 2v_*^2\Lambda_1 \leq \|\mathbf{f} + \bar{\mathbf{f}}\|_{L^1(\mathbb{R})} (C_2\Lambda + C_3\mathcal{R}(\mathbf{f})), \quad (3.20)$$

$$\frac{d\mathcal{H}(t)}{dt} \leq -C_4\Lambda + C_5\mathcal{R}(\mathbf{f}), \quad (3.21)$$

où

$$\mathcal{R}(\mathbf{f}) := \sum_{m=1}^{\bar{N}} \int_{\mathbb{R}} \bar{v}_m |R_m(\mathbf{f})| (x) dx, \quad (3.22)$$

et C_1, C_2, C_3, C_4, C_5 sont des constantes positives qui ne dépendent que de $\mathbf{f}_0, \bar{\mathbf{f}}_0, B_k^{ij}, \bar{B}_k^{ij}$, des vitesses et des masses, mais pas de $\bar{\mathbf{f}}$.

Puisque la fonctionnelle \mathcal{H} est équivalente à la norme L^1 , le Théorème 3.2.3 peut être traduit en un résultat d'estimation d'erreur a posteriori. Le corollaire suivant constitue la forme naturelle de notre résultat principal.

Corollaire 3.2.4. *Sous les mêmes conditions que le Théorème 3.2.3, on a pour tout T ,*

$$\|\mathbf{f}(\cdot, T) - \bar{\mathbf{f}}(\cdot, T)\|_{L^1(\mathbb{R})} \leq C\|\mathbf{f}_0 - \bar{\mathbf{f}}_0\|_{L^1(\mathbb{R})} + C' \int_0^T \mathcal{R}(\mathbf{f})(\tau) d\tau,$$

où C, C' sont des constantes positives indépendantes de \mathbf{f} et $\bar{\mathbf{f}}$.

Remarque 3.2.1. *Ce corollaire est énoncé dans une forme directement utilisable en calculs dans un algorithme adaptatif. En effet, pour des modèles de mêmes conditions initiales, on a l'estimation donnée par*

$$\text{Erreur} \approx C' \|\mathcal{R}(\mathbf{f})\|_{L^1(\mathbb{R} \times [0, T])}, \quad (3.23)$$

où C' est une constante à déterminer.

Afin de démontrer le Théorème 3.2.3, nous établissons les résultats intermédiaires suivants :

Lemme 3.2.5. *Supposons que (3.1) et (3.2) vérifient les hypothèses (2.22) - (2.28) et soient \mathbf{f} , $\bar{\mathbf{f}}$ les solutions provenant des données initiales \mathbf{f}_0 , $\bar{\mathbf{f}}_0$ pour les équations (3.1) et (3.2) respectivement. Alors*

$$\begin{aligned} (\bar{Q}_i(\mathbf{f}) - \bar{Q}_i(\bar{\mathbf{f}}))(x)\delta_i(x) &= \sum_{(m,n) \in D^*} \bar{B}_i^{mn} \frac{\delta_i}{\delta_m} |f_m - \bar{f}_m|(x)(f_n + \bar{f}_n)(x) \\ &\quad + \sum_{n=1}^{\bar{N}} \bar{B}_i^{nn} \frac{\delta_i}{\delta_n} |f_n - \bar{f}_n|(x)(f_n + \bar{f}_n)(x) \end{aligned} \quad (3.24)$$

$$\begin{aligned} &\sum_{i=1}^{\bar{N}} \sum_{n=1}^{\bar{N}} \bar{\nu}_i \bar{B}_i^{nn} \frac{\delta_i}{\delta_n} |f_n - \bar{f}_n|(x)(f_n + \bar{f}_n)(x) \\ &= \sum_{(i,n) \in D^*} \bar{\nu}_i \bar{B}_i^{nn} \left(\frac{\delta_i}{\delta_n} - 1 \right) |f_n - \bar{f}_n|(x)(f_n + \bar{f}_n)(x) \leq 0 \end{aligned} \quad (3.25)$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^{\bar{N}} (\bar{v}_i - \bar{v}_j) \bar{\nu}_i \bar{\nu}_j \sum_{n=1}^{\bar{N}} \bar{B}_i^{nn} \frac{\delta_i}{\delta_n} |f_n - \bar{f}_n|(x) (f_n + \bar{f}_n)(x) \\
&= \sum_{(i,n) \in D^*} (\bar{v}_i - \bar{v}_j) \bar{\nu}_i \bar{\nu}_j \bar{B}_i^{nn} \left(\frac{\delta_i}{\delta_n} - 1 \right) \times \\
& \quad |f_n - \bar{f}_n|(x) (f_n + \bar{f}_n)(x) \quad (3.26)
\end{aligned}$$

où $f_k = 0$ pour $k \in \{N+1, \dots, \bar{N}\}$ et $\delta_i = \delta_i(x)$.

Démonstration. La preuve complète est différée à la section I.1. \square

Lemme 3.2.6. *Supposons que (3.1) et (3.2) vérifient les hypothèses (2.22) - (2.28) et soient $\mathbf{f}, \bar{\mathbf{f}}$ les solutions provenant des données initiales $\mathbf{f}_0, \bar{\mathbf{f}}_0$, pour les équations (3.1) et (3.2) respectivement. Alors $\mathcal{L}_1(t)$, $\mathcal{L}_2(t)$, $\mathcal{Q}(t)$ vérifient :*

$$\frac{d\mathcal{L}_1(t)}{dt} = \sum_{i=1}^N \int_{\mathbb{R}} \nu_i R_i(\mathbf{f}) \delta_i dx + \sum_{i=1}^N \int_{\mathbb{R}} (\bar{Q}_n(\mathbf{f}) - \bar{Q}_n(\bar{\mathbf{f}})) \delta_i dx \quad (3.27)$$

$$\frac{d\mathcal{L}_2(t)}{dt} = \sum_{i=N+1}^{\bar{N}} \int_{\mathbb{R}} \bar{\nu}_i \bar{Q}_n(\bar{\mathbf{f}}) \operatorname{sgn}(\bar{f}_i) dx \quad (3.28)$$

$$\begin{aligned}
& \frac{d\mathcal{Q}^+(t)}{dt} + \sum_{(m,n) \in D} \int_{\mathbb{R}} (\bar{v}_m - \bar{v}_n)^2 \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n |f_m - \bar{f}_m|(x) (f_n + \bar{f}_n)(x) dx \\
&= \sum_{(m,n) \in D} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \mathbb{1}_{x < y} (\bar{v}_m - \bar{v}_n) \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n (Q_m(\mathbf{f}) - \bar{Q}_m(\bar{\mathbf{f}}))(x) \delta_m \times \\
& \quad (f_n + \bar{f}_n)(y) dx dy \quad (3.29)
\end{aligned}$$

où $f_k = 0$ pour $k \in \{N+1, \dots, \bar{N}\}$.

Il existe des identités analogues pour $\mathcal{Q}^-(t)$ si l'on remplace $\mathbb{1}_{x < y}$ par $\mathbb{1}_{y < x}$.

Démonstration. Nous commencerons avec la preuve de l'identité (3.27) pour $\mathcal{L}_1(t)$:

$$\mathcal{L}_1(t) := \sum_{m=1}^N \int_{\mathbb{R}} \nu_m |f_m(x, t) - \bar{f}_m(x, t)| dx \quad m = 1, \dots, N$$

En partant des équations (3.1) et (3.2),

$$\partial_t f_i(x, t) + v_i \partial_x f_i(x, t) = Q_i(\mathbf{f}),$$

$$\partial_t \bar{f}_i(x, t) + \bar{v}_i \partial_x \bar{f}_i(x, t) = \bar{Q}_i(\bar{\mathbf{f}}),$$

en ignorant la dépendance sur t , et en utilisant $\delta_i = \text{sgn}(f_i - \bar{f}_i)$, on montre aisément que

$$\begin{aligned} \partial_t |f_i(x) - \bar{f}_i(x)| + v_i \partial_x |f_i(x) - \bar{f}_i(x)| &= (Q_i(\mathbf{f}) - \bar{Q}_i(\bar{\mathbf{f}})) \delta_i, \\ \partial_t \sum_{i=1}^N \nu_i |f_i(x) - \bar{f}_i(x)| + \partial_x \sum_{i=1}^N \nu_i v_i |f_i(x) - \bar{f}_i(x)| &= \sum_{i=1}^N \nu_i (Q_i(\mathbf{f}) - \bar{Q}_i(\bar{\mathbf{f}})) \delta_i. \end{aligned} \quad (3.30)$$

On intègre alors la première de ces équations pour obtenir

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N \int_{\mathbb{R}} \nu_i |f_i(x) - \bar{f}_i(x)| dx + \int_{\mathbb{R}} \partial_x \sum_{i=1}^N \nu_i v_i |f_i(x) - \bar{f}_i(x)| dx \\ = \sum_{i=1}^N \int_{\mathbb{R}} \nu_i (Q_i(\mathbf{f}) - \bar{Q}_i(\bar{\mathbf{f}})) \delta_i dx. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Le deuxième terme disparaît car les f_i, \bar{f}_i sont lisses et dans $L_1(\mathbb{R})$. Grâce à la définition

de $\mathcal{L}_1(t)$, on trouve précisément l'égalité (3.27) :

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{L}_1(t)}{dt} &= \sum_{i=1}^N \int_{\mathbb{R}} \nu_i (Q_i(\mathbf{f}) - \bar{Q}_i(\bar{\mathbf{f}})) \delta_i dx \\ &= \sum_{i=1}^N \int_{\mathbb{R}} \nu_i \left[Q_i(\mathbf{f}) - \bar{Q}_i(\mathbf{f}) + \bar{Q}_i(\mathbf{f}) - \bar{Q}_i(\bar{\mathbf{f}}) \right] \delta_i dx \\ &= \sum_{i=1}^N \int_{\mathbb{R}} \nu_i R_i(\mathbf{f})(x) \delta_i dx + \sum_{i=1}^N \int_{\mathbb{R}} \nu_i \left[\bar{Q}_i(\mathbf{f}) - \bar{Q}_i(\bar{\mathbf{f}}) \right] \delta_i dx. \end{aligned}$$

On démontre maintenant l'identité (3.28) pour $\mathcal{L}_2(t)$ définie par

$$\mathcal{L}_2(t) := \sum_{m=N+1}^{\bar{N}} \int_{\mathbb{R}} \bar{\nu}_m |\bar{f}_m(x, t)| dx, \quad m = N+1, \dots, \bar{N}.$$

On définit $\delta_i = \text{sgn}(-\bar{f}_i)$ pour $i \in \{N+1, \dots, \bar{N}\}$. En multipliant l'équation (3.2) par δ_i , on obtient

$$\begin{aligned} \partial_t |\bar{f}_i(x)| + \partial_x \bar{\nu}_i |\bar{f}_i(x)| &= -\bar{Q}_i(\bar{\mathbf{f}}) \delta_i, \\ \partial_t \sum_{i=N+1}^{\bar{N}} \bar{\nu}_i |\bar{f}_i(x)| + \partial_x \sum_{i=N+1}^{\bar{N}} \bar{\nu}_i \bar{\nu}_i |\bar{f}_i(x)| &= - \sum_{i=N+1}^{\bar{N}} \bar{\nu}_i \bar{Q}_i(\bar{\mathbf{f}}) \delta_i. \end{aligned}$$

En intégrant par rapport à la variable d'espace x , et en utilisant encore le fait que $\bar{\mathbf{f}}$ est lisse et dans $L^1(\mathbb{R})$, alors on démontre

$$\frac{d\mathcal{L}_2(t)}{dt} = \partial_t \int_{\mathbb{R}} \sum_{i=N+1}^{\bar{N}} \bar{\nu}_i |\bar{f}_i|(x) dx = - \sum_{i=N+1}^{\bar{N}} \int_{\mathbb{R}} \bar{\nu}_i \bar{Q}_i(\bar{\mathbf{f}}) \delta_i dx. \quad (3.32)$$

Finalement, on démontre l'identité (3.29) du Lemme 3.2.6 pour $\mathcal{Q}^+(t)$:

Rappelons que $\mathcal{Q}(t) := \mathcal{Q}^+(t) + \mathcal{Q}^-(t)$ où

$$\mathcal{Q}^+(t) = \sum_D \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \mathbb{1}_{x < y} (v_m - v_n) \nu_m \nu_n |f_m(x) - \bar{f}_m(x)| (f_n(y) + \bar{f}_n(y)) dx dy$$

En partant des équations (3.1), (3.2) et

$$\partial_t |f_m - \bar{f}_m|(x) + v_n \partial_x |f_m - \bar{f}_m|(x) = (Q_m(\mathbf{f}) - \bar{Q}_m(\bar{\mathbf{f}}))(x) \delta_m$$

et en utilisant les identités $\partial_x \mathbb{1}_{x < y} = -\delta(x - y)$, $\partial_y \mathbb{1}_{x < y} = +\delta(x - y)$ et $\partial_t \mathbb{1}_{x < y} = 0$, alors on montre aisément que pour $(m, n) \in D$,

$$\begin{aligned} & \partial_t (\mathbb{1}_{x < y} |f_m - \bar{f}_m|(x) f_n(y)) + (\bar{v}_m \partial_x + \bar{v}_n \partial_y) (\mathbb{1}_{x < y} |f_m - \bar{f}_m|(x) f_n(y)) \\ & + (\bar{v}_m - \bar{v}_n) \delta(x - y) |f_m - \bar{f}_m|(x) f_n(y) \\ & = \mathbb{1}_{x < y} \left[(Q_m(\mathbf{f}) - \bar{Q}_m(\bar{\mathbf{f}}))(x) \delta_m f_n(y) + |f_m - \bar{f}_m|(x) Q_n(\mathbf{f})(y) \right]. \end{aligned} \quad (3.33)$$

En se servant de cette dernière équation, et en effectuant des calculs semblables à partir du produit de (3.1) et (3.2) par $(\bar{v}_m - \bar{v}_n) \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n$, on obtient

$$\begin{aligned} & \partial_t \left(\sum_{(m,n) \in D} (\bar{v}_m - \bar{v}_n) \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n \mathbb{1}_{x < y} |f_m - \bar{f}_m|(x) (f_n + \bar{f}_n)(y) \right) \\ & + \sum_{(m,n) \in D} (\bar{v}_m - \bar{v}_n) \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n (\bar{v}_m \partial_x + \bar{v}_n \partial_y) \left(\mathbb{1}_{x < y} |f_m - \bar{f}_m|(x) (f_n + \bar{f}_n)(y) \right) \\ & + \sum_{(m,n) \in D} (\bar{v}_m - \bar{v}_n)^2 \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n \delta(x - y) |f_m - \bar{f}_m|(x) (f_n + \bar{f}_n)(y) \\ & = \mathbb{1}_{x < y} \sum_{(m,n) \in D} (\bar{v}_m - \bar{v}_n) \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n (Q_m(\mathbf{f}) - \bar{Q}_m(\bar{\mathbf{f}}))(x) \delta_m (f_n + \bar{f}_n)(y) \\ & + \mathbb{1}_{x < y} \sum_{(m,n) \in D} (\bar{v}_m - \bar{v}_n) \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n |f_m - \bar{f}_m|(x) (Q_n(\mathbf{f}) + \bar{Q}_n(\bar{\mathbf{f}}))(y) \end{aligned} \quad (3.34)$$

Nous prendrons le temps de montrer que le deuxième terme à droite de (3.34) est nul

grâce à la conservation de masse et de quantité de mouvement. On peut séparer le dernier terme de la manière suivante :

$$\begin{aligned}
 & (\bar{v}_m - \bar{v}_n) \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n |f_m - \bar{f}_m| (x) (Q_n(\mathbf{f}) + \bar{Q}_n(\bar{\mathbf{f}}))(y) \\
 &= (\bar{v}_m - \bar{v}_n) \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n |f_m - \bar{f}_m| (x) \bar{Q}_n(\bar{\mathbf{f}})(y) \\
 &+ \bar{v}_m \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n |f_m - \bar{f}_m| (x) Q_n(\mathbf{f})(y) - \bar{v}_n \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n |f_m - \bar{f}_m| (x) Q_n(\mathbf{f})(y)
 \end{aligned} \tag{3.35}$$

En réorganisant les deux derniers termes, on observe

$$\begin{aligned}
 \sum_{(m,n) \in D} \bar{v}_m \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n |f_m - \bar{f}_m| (x) Q_n(\mathbf{f}) &= \sum_m \bar{v}_m \bar{\nu}_m |f_m - \bar{f}_m| (x) \underbrace{\sum_n \bar{\nu}_n Q_n(\mathbf{f})}_0 \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

par conservation de masse, et

$$\begin{aligned}
 \sum_{(m,n) \in D} \bar{v}_n \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n |f_m - \bar{f}_m| (x) Q_n(\mathbf{f}) &= \sum_m \bar{\nu}_m |f_m - \bar{f}_m| (x) \underbrace{\sum_n \bar{v}_n \bar{\nu}_n Q_n(\mathbf{f})}_0 \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

par conservation de quantité de mouvement. Un calcul semblable suffit pour montrer que

$$\mathbb{1}_{x < y} \sum_{(m,n) \in D} (\bar{v}_m - \bar{v}_n) \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n |f_m - \bar{f}_m| (x) \bar{Q}_n(\bar{\mathbf{f}})(y) = 0.$$

En conclusion, après intégration de (3.34), le deuxième terme à gauche est nul car $\mathbf{f}, \bar{\mathbf{f}} \in$

$L^1(\mathbb{R})$, et il ne reste que

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dt} \left(\int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \sum_{(m,n) \in D} \mathbb{1}_{x < y} (\bar{v}_m - \bar{v}_n) \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n |f_m(x) - \bar{f}_m(x)| (f_n(y) + \bar{f}_n(y)) dx dy \right) \\
& + \int_{\mathbb{R}} \sum_{(m,n) \in D} (\bar{v}_m - \bar{v}_n)^2 \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n |f_m - \bar{f}_m|(x) (f_n + \bar{f}_n)(x) dx \\
& = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \mathbb{1}_{x < y} \sum_{(m,n) \in D} (\bar{v}_m - \bar{v}_n) \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n \times \\
& \quad (Q_m(\mathbf{f}) - \bar{Q}_m(\bar{\mathbf{f}}))(x) \delta_m(f_n + \bar{f}_n)(y) dx dy
\end{aligned}$$

Les preuves pour les identités en $\mathbb{1}_{y < x}$ sont identiques. \square

Lemme 3.2.7. *Sous les mêmes hypothèses que le Théorème 3.2.3, on a*

$$\begin{aligned}
& \frac{d\mathcal{L}(t)}{dt} + \int_{\mathbb{R}} \sum_{i=1}^{\bar{N}} \sum_{\substack{n=1 \\ n \neq i}}^{\bar{N}} \bar{\nu}_i \bar{B}_i^{nn} (1 - \frac{\delta_i}{\delta_n}) |f_n - \bar{f}_n|(x) (f_n + \bar{f}_n)(x) dx \\
& = \int_{\mathbb{R}} \sum_{i=1}^{\bar{N}} \sum_{(m,n) \in D^*} \bar{\nu}_i \bar{B}_i^{mn} \frac{\delta_i}{\delta_m} |f_m - \bar{f}_m|(x) (f_n + \bar{f}_n)(x) dx \\
& \quad + \sum_{i=1}^{\bar{N}} \int_{\mathbb{R}} \nu_i R_i(\mathbf{f}) \delta_i dx
\end{aligned} \tag{3.36}$$

où $f_k = 0$ pour $k \in \{N+1, \dots, \bar{N}\}$ et le deuxième terme à gauche de l'égalité (3.36) est positif.

Démonstration. Le point de départ est le résultat (3.27) du Lemme 3.2.6,

$$\frac{d\mathcal{L}_1(t)}{dt} = \sum_{i=1}^N \int_{\mathbb{R}} \nu_i R_i(\mathbf{f}) \delta_i dx + \sum_{i=1}^N \int_{\mathbb{R}} (\bar{Q}_i(\mathbf{f}) - \bar{Q}_i(\bar{\mathbf{f}})) \delta_i dx$$

et le résultat (3.28) du Lemme 3.2.6, en posant $\delta_i = \operatorname{sgn}(-\bar{f}_i)$:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{L}_2(t)}{dt} &= \sum_{i=N+1}^{\bar{N}} \int_{\mathbb{R}} \bar{\nu}_i \bar{Q}_i(\bar{\mathbf{f}}) \delta_i dx \\ &= \sum_{i=N+1}^{\bar{N}} \int_{\mathbb{R}} -\bar{\nu}_i (\bar{Q}_i(\mathbf{f}) - \bar{Q}_i(\bar{\mathbf{f}})) \delta_i dx \\ &\quad + \sum_{i=N+1}^{\bar{N}} \int_{\mathbb{R}} \bar{\nu}_i R_i(\mathbf{f}) \delta_i dx, \end{aligned}$$

où on a utilisé $-\bar{\nu}_i \bar{Q}_i(\mathbf{f}) \operatorname{sgn}(\bar{f}_i) = \bar{\nu}_i R_i(\mathbf{f}) \delta_i$ pour $i \in \{N+1, \dots, \bar{N}\}$. La somme des égalités ci-dessus donne

$$\frac{d}{dt} (\mathcal{L}_1(t) + \mathcal{L}_2(t)) = \sum_{i=1}^{\bar{N}} \int_{\mathbb{R}} \bar{\nu}_i R_i(\mathbf{f}) \delta_i dx + \sum_{i=1}^{\bar{N}} \int_{\mathbb{R}} (\bar{Q}_i(\mathbf{f}) - \bar{Q}_i(\bar{\mathbf{f}})) \delta_i dx. \quad (3.37)$$

Nous utiliserons maintenant l'identité (3.24) du Lemme 3.2.5

$$\begin{aligned} (\bar{Q}_i(\mathbf{f}) - \bar{Q}_i(\bar{\mathbf{f}}))(x) \delta_i &= \sum_{(i,n) \in D^*} \bar{B}_i^{mn} \frac{\delta_i}{\delta_m} |f_m - \bar{f}_m|(x) (f_n + \bar{f}_n)(x) \\ &\quad + \sum_{n=1}^{\bar{N}} \bar{B}_i^{nn} \frac{\delta_i}{\delta_n} |f_n - \bar{f}_n|(x) (f_n + \bar{f}_n)(x), \end{aligned}$$

pour écrire le deuxième terme de (3.37) de la façon suivante :

$$\begin{aligned} &\sum_{i=1}^{\bar{N}} \int_{\mathbb{R}} \bar{\nu}_i (\bar{Q}_i(\mathbf{f}) - \bar{Q}_i(\bar{\mathbf{f}})) \delta_i dx \\ &= \sum_{i=1}^{\bar{N}} \int_{\mathbb{R}} \bar{\nu}_i \sum_{m,n=1, m \neq n}^{\bar{N}} \bar{B}_i^{mn} \frac{\delta_i}{\delta_m} |f_m - \bar{f}_m|(x) (f_n + \bar{f}_n)(x) dx \\ &\quad + \sum_{i=1}^{\bar{N}} \int_{\mathbb{R}} \bar{\nu}_i \sum_{n=1}^{\bar{N}} \bar{B}_i^{nn} \frac{\delta_i}{\delta_n} |f_n - \bar{f}_n|(x) (f_n + \bar{f}_n)(x) dx. \end{aligned} \quad (3.38)$$

En utilisant la conservation de la masse $0 = \sum_{i=1, i \neq n}^{\bar{N}} \bar{\nu}_i \bar{B}_i^{nn} + \bar{\nu}_n \bar{B}_n^{nn}$, alors on peut

réécrire le deuxième terme de (3.38) de la manière suivante :

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^{\bar{N}} \int_{\mathbb{R}} \bar{\nu}_i \sum_{n=1}^{\bar{N}} \bar{B}_i^{nn} \frac{\delta_i}{\delta_n} |f_n - \bar{f}_n| (x) (f_n + \bar{f}_n)(x) dx \\
&= \int_{\mathbb{R}} \sum_{(i,n) \in D^*} \bar{\nu}_i \bar{B}_i^{nn} \frac{\delta_i}{\delta_n} |f_n - \bar{f}_n| (x) (f_n + \bar{f}_n)(x) dx \\
&\quad + \int_{\mathbb{R}} \sum_{n=1}^{\bar{N}} \bar{\nu}_n \bar{B}_n^{nn} |f_n - \bar{f}_n| (x) (f_n + \bar{f}_n)(x) dx \\
&= \int_{\mathbb{R}} \sum_{(i,n) \in D^*} \bar{\nu}_i \bar{B}_i^{nn} \frac{\delta_i}{\delta_n} |f_n - \bar{f}_n| (x) (f_n + \bar{f}_n)(x) dx \\
&\quad - \int_{\mathbb{R}} \sum_{n=1}^{\bar{N}} \left(\sum_{\substack{i=1 \\ i \neq n}}^{\bar{N}} \bar{\nu}_i \bar{B}_i^{nn} \right) |f_n - \bar{f}_n| (x) (f_n + \bar{f}_n)(x) dx \\
&= \int_{\mathbb{R}} \sum_{(i,n) \in D^*} \bar{\nu}_i \bar{B}_i^{nn} \left(\frac{\delta_i}{\delta_n} - 1 \right) |f_n - \bar{f}_n| (x) (f_n + \bar{f}_n)(x) dx. \tag{3.39}
\end{aligned}$$

En conclusion, l'identité (3.37) se réécrit, à l'aide de (3.38) et (3.39), sous la forme

$$\begin{aligned}
& \frac{d\mathcal{L}(t)}{dt} + \sum_{(i,n) \in D^*} \int_{\mathbb{R}} \bar{\nu}_i \bar{B}_i^{nn} \left(1 - \frac{\delta_i}{\delta_n} \right) |f_n - \bar{f}_n| (x) (f_n + \bar{f}_n)(x) dx \\
&= \sum_{i=1}^{\bar{N}} \sum_{(m,n) \in D^*} \int_{\mathbb{R}} \bar{B}_i^{mn} \frac{\delta_i}{\delta_m} |f_m - \bar{f}_m| (x) (f_m + \bar{f}_m)(x) dx \\
&\quad + \sum_{i=1}^{\bar{N}} \int_{\mathbb{R}} \bar{\nu}_i R_i(\mathbf{f}) \delta_i dx. \tag{3.40}
\end{aligned}$$

Le deuxième terme à gauche est positif car $\bar{\nu}_i$, \bar{B}_i^{nn} , $1 - \frac{\delta_i}{\delta_n}$ et les densités sont positives.

□

3.2.1 Preuve de Théorème 3.2.3

Pour des raisons de clarté de l'exposé, nous présentons une preuve en trois étapes.

Étape 1 : Preuve de (3.19)

En utilisant le résultat (3.36) du Lemme 3.2.7 (où le deuxième terme à gauche est positif), et en tenant compte des définitions de Λ_1 , Λ_2 , et \mathcal{R} données respectivement par les équations (3.16), (3.17) et (3.22), on déduit l'inégalité

$$\frac{d\mathcal{L}(t)}{dt} + \Lambda_2 \leq C_1 \Lambda_1 + \mathcal{R}(\mathbf{f}) \quad (3.41)$$

où $C_1 = \sum_{i=1}^{\bar{N}} \sum_{(m,n) \in D^*} \frac{|\bar{B}_i^{mn}|}{\bar{\nu}_n \bar{\nu}_m}$ est une constante positive indépendante du temps et de la fonction $\bar{\mathbf{f}}$.

Étape 2 : Preuve de (3.20)

On ne traitera, ici, que les calculs de \mathcal{Q}^+ , mais les calculs pour \mathcal{Q}^- sont semblables. Nous rappelons au lecteur le résultat (3.29) du Lemme 3.2.6 où l'on définit $f_k = 0$ pour $k \in \{N+1, \dots, \bar{N}\}$:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{Q}^+}{dt} + \sum_{(m,n) \in D} \int_{\mathbb{R}} (\bar{\nu}_m - \bar{\nu}_n)^2 \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n |f_m - \bar{f}_m|(x) (f_n + \bar{f}_n)(x) dx \\ = \sum_{(m,n) \in D} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \mathbb{1}_{x < y} (\bar{\nu}_m - \bar{\nu}_n) \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n (Q_m(\mathbf{f}) - \bar{Q}_m(\bar{\mathbf{f}}))(x) \delta_m \times \\ (f_n + \bar{f}_n)(y) dx dy \end{aligned} \quad (3.42)$$

Le deuxième terme à gauche de l'équation (3.42) est clairement positif et on a

$$\sum_{(m,n) \in D} \int_{\mathbb{R}} (\bar{v}_m - \bar{v}_n)^2 \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n |f_m - \bar{f}_m|(x) (f_n + \bar{f}_n)(x) dx \geq v_*^2 \Lambda_1(\mathbf{f}, \bar{\mathbf{f}})$$

où $v_*^2 = \min_{(m,n) \in D^*} (\bar{v}_m - \bar{v}_n)^2$ et Λ_1 est défini dans l'équation (3.16).

Quant au terme à droite de (3.42), on peut écrire

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \mathbb{1}_{x < y} \sum_{(m,n) \in D} (\bar{v}_m - \bar{v}_n) \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n \left[(Q_m(\mathbf{f}) - \bar{Q}_m(\mathbf{f}))(x) + \right. \\ & \quad \left. (\bar{Q}_m(\mathbf{f}) - \bar{Q}_m(\bar{\mathbf{f}}))(x) \right] \delta_m(f_n + \bar{f}_n)(y) dx dy \\ &= \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \mathbb{1}_{x < y} \sum_{(m,n) \in D} (\bar{v}_m - \bar{v}_n) \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n (\bar{Q}_m(\mathbf{f}) - \bar{Q}_m(\bar{\mathbf{f}}))(x) \delta_m \times \\ & \quad (f_n + \bar{f}_n)(y) dx dy \tag{3.43} \\ &+ \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \mathbb{1}_{x < y} \sum_{(m,n) \in D} (\bar{v}_m - \bar{v}_n) \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n R_m(\mathbf{f})(x) \delta_m(f_n + \bar{f}_n)(y) dx dy \\ &:= A + B, \end{aligned}$$

On utilise l'identité (3.24) du Lemme 3.2.5 pour traiter A de la manière suivante

$$\begin{aligned}
A &= \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \mathbb{1}_{x < y} \sum_{(m,n) \in D} (\bar{v}_m - \bar{v}_n) \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n (\bar{Q}_m(\mathbf{f}) - \bar{Q}_m(\bar{\mathbf{f}}))(x) \delta_m(f_n + \bar{f}_n)(y) dx dy \\
&= \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \mathbb{1}_{x < y} \sum_n (f_n + \bar{f}_n)(y) \left[\sum_m (\bar{v}_m - \bar{v}_n) \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n (\bar{Q}_m(\mathbf{f}) - \bar{Q}_m(\bar{\mathbf{f}}))(x) \delta_m \right] dx dy \\
&= \sum_n \int_{\mathbb{R}} (f_n + \bar{f}_n)(y) \left[\sum_m (\bar{v}_m - \bar{v}_n) \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n \times \right. \\
&\quad \left. \int_{\mathbb{R}} \mathbb{1}_{x < y} \sum_{(i,j) \in D^*} \bar{B}_m^{ij} \frac{\delta_m}{\delta_j} |f_j - \bar{f}_j|(x) (f_i + \bar{f}_i)(x) \right. \\
&\quad \left. + \sum_m (\bar{v}_m - \bar{v}_n) \bar{\nu}_n \sum_{i=1}^{\bar{N}} \int_{\mathbb{R}} \mathbb{1}_{x < y} \bar{\nu}_m \bar{B}_m^{ii} \frac{\delta_m}{\delta_i} |f_i - \bar{f}_i|(x) (f_i + \bar{f}_i)(x) \right] dx dy
\end{aligned}$$

Ensuite, on applique (3.26) sur le deuxième terme et on trouve

$$\begin{aligned}
&\sum_n \int_{\mathbb{R}} (f_n + \bar{f}_n)(y) \times \\
&\quad \sum_{(m,i) \in D^*} \int_{\mathbb{R}} \mathbb{1}_{x < y} (\bar{v}_m - \bar{v}_n) \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n \bar{B}_m^{ii} \left(\frac{\delta_m}{\delta_i} - 1 \right) |f_i - \bar{f}_i|(x) (f_i + \bar{f}_i)(x) dx dy \\
&\leq \sum_n \int_{\mathbb{R}} (f_n + \bar{f}_n)(y) dy \times \\
&\quad \sum_{(m,i) \in D^*} \int_{\mathbb{R}} c_1 \cdot \bar{\nu}_m |\bar{B}_m^{ii}| \left| \frac{\delta_m}{\delta_i} - 1 \right| |f_i - \bar{f}_i|(x) (f_i + \bar{f}_i)(x) dx \\
&\leq \|\mathbf{f} + \bar{\mathbf{f}}\|_{L^1(\mathbb{R})} \cdot c_1 \cdot \Lambda_2(\mathbf{f}, \bar{\mathbf{f}})
\end{aligned} \tag{3.44}$$

où $c_1 = \sup_{(m,n) \in D^*} \{|\bar{v}_m - \bar{v}_n| \bar{\nu}_n\}$, et où on a défini

$$\|\mathbf{f} + \bar{\mathbf{f}}\|_{L^1(\mathbb{R})} = \sum_i \|f_i + \bar{f}_i\|_{L^1(\mathbb{R})}.$$

On traite l'autre terme comme

$$\begin{aligned}
& \sum_n \int_{\mathbb{R}} (f_n + \bar{f}_n)(y) \times \\
& \quad \sum_m (\bar{v}_m - \bar{v}_n) \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n \int_{\mathbb{R}} \mathbb{1}_{x < y} \sum_{(i,j) \in D^*} \bar{B}_m^{ij} \frac{\delta_m}{\delta_j} |f_j - \bar{f}_j|(x) (f_i + \bar{f}_i)(x) dx dy \\
& = \sum_n \int_{\mathbb{R}} (f_n + \bar{f}_n)(y) \times \\
& \quad \int_{\mathbb{R}} \mathbb{1}_{x < y} \sum_m \sum_{(i,j) \in D^*} (\bar{v}_m - \bar{v}_n) \frac{\bar{\nu}_m \bar{\nu}_n}{\bar{\nu}_i \bar{\nu}_j} \bar{B}_m^{ij} \frac{\delta_m}{\delta_j} |f_j - \bar{f}_j|(x) (f_i + \bar{f}_i)(x) dx dy \\
& \leq \sum_n \int_{\mathbb{R}} (f_n + \bar{f}_n)(y) dy \times \int_{\mathbb{R}} \sum_{(i,j) \in D^*} c_2 \bar{\nu}_i \bar{\nu}_j \bar{B}_m^{ij} |f_j - \bar{f}_j|(x) (f_i + \bar{f}_i)(x) dx \\
& \leq \|f + \bar{f}\|_{L^1(\mathbb{R})} \cdot c_2 \cdot \Lambda_1(f, \bar{f})
\end{aligned} \tag{3.45}$$

où $c_2 = \max_{(i,j),n} \{ \sum_m |\bar{v}_m - \bar{v}_n| \frac{\nu_m \nu_n}{\nu_i \nu_j} |\bar{B}_m^{ij}| \}$.

On traite B de la façon suivante :

$$\begin{aligned}
B & = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \mathbb{1}_{x < y} \sum_{(m,n) \in D} (\bar{v}_m - \bar{v}_n) \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n R_m(f)(x) \delta_m(x) (f_n + \bar{f}_n)(y) dx dy \\
& = \int_{\mathbb{R}} \sum_n (f_n + \bar{f}_n)(y) \left[\sum_m \int_{\mathbb{R}} \mathbb{1}_{x < y} (\bar{v}_m - \bar{v}_n) \bar{\nu}_m \bar{\nu}_n R_m(f)(x) \delta_m(x) dx \right] dy \\
& \leq \int_{\mathbb{R}} \sum_n (f_n + \bar{f}_n)(y) dy \cdot c_3 \cdot \sum_m \int_{\mathbb{R}} \bar{\nu}_n |R_m(f)(x)| dx \\
& \leq \|f + \bar{f}\|_{L^1(\mathbb{R})} c_3 \mathcal{R}(f)
\end{aligned} \tag{3.46}$$

où $c_3 = \max_{(m,n) \in D} \{ |\bar{v}_m - \bar{v}_n| \bar{\nu}_n \}$, et $\mathcal{R}(f)$ est défini en (3.22).

On résume les résultats ci-dessus sous la forme de l'inégalité :

$$A + B \leq c_4 \|f + \bar{f}\|_{L^1(\mathbb{R})} \Lambda(f, \bar{f}) + c_3 \|f + \bar{f}\|_{L^1(\mathbb{R})} \mathcal{R}(f), \tag{3.47}$$

où $c_4 = \max\{c_1, c_2\}$ est positif, indépendant du temps et de \bar{f} .

Il serait possible d'effectuer un calcul semblable pour obtenir une borne du terme $\mathcal{Q}^-(t)$ ($\mathcal{Q}^+(t)$ avec $\mathbb{1}_{x < y}$ remplacé par $\mathbb{1}_{y < x}$). En prenant la somme des bornes obtenues pour $\frac{d\mathcal{Q}^+}{dt}$ et $\frac{d\mathcal{Q}^-}{dt}$, on obtient

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{Q}(t)}{dt} + 2v_*^2\Lambda_1 &\leq c_4\|\mathbf{f} + \bar{\mathbf{f}}\|_{L^1(\mathbb{R})}\Lambda \\ &\quad + c_3\|\mathbf{f} + \bar{\mathbf{f}}\|_{L^1(\mathbb{R})}\mathcal{R}(\mathbf{f}) \\ &\leq \|\mathbf{f} + \bar{\mathbf{f}}\|_{L^1(\mathbb{R})}(c_4\Lambda + c_3\mathcal{R}(\mathbf{f})) \end{aligned} \quad (3.48)$$

Étape 3 : Preuve de (3.21)

En partant des résultats précédents, on peut écrire

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{H}(t)}{dt} &= \frac{d\mathcal{L}(t)}{dt} + M\frac{d\mathcal{Q}(t)}{dt} \\ &\leq [-2v_*^2M + C_1 + Mc_4\|\mathbf{f} + \bar{\mathbf{f}}\|_{L^1(\mathbb{R})}]\Lambda_1(f, \bar{f})(t) \\ &\quad + [-1 + Mc_4\|\mathbf{f} + \bar{\mathbf{f}}\|_{L^1(\mathbb{R})}]\Lambda_2(f, \bar{f})(t) \\ &\quad + [1 + Mc_3\|\mathbf{f} + \bar{\mathbf{f}}\|_{L^1(\mathbb{R})}]\mathcal{R}(\mathbf{f}). \end{aligned} \quad (3.49)$$

Si la masse L^1 des deux solutions est suffisamment petite,

$$\|\mathbf{f} + \bar{\mathbf{f}}\|_{L^1(\mathbb{R})} < 2v_*^2, \quad (3.50)$$

alors en choisissant M dans l'intervalle non vide

$$0 < \frac{C_1}{2v_*^2 - c_4\|\mathbf{f} + \bar{\mathbf{f}}\|_{L^1(\mathbb{R})}} < M < \frac{1}{c_4\|\mathbf{f} + \bar{\mathbf{f}}\|_{L^1(\mathbb{R})}}, \quad (3.51)$$

il existe un coefficient positif $c_6 > 0$, tel que

$$\frac{d\mathcal{H}(t)}{dt} \leq -c_6\Lambda + [1 + Mc_3\|\mathbf{f} + \bar{\mathbf{f}}\|_{L^1(\mathbb{R})}]\mathcal{R}(\mathbf{f})$$

où le coefficient du résidu est positif. Si nous prenons pour M la valeur maximale $M = \frac{1}{c_4\|\mathbf{f} + \bar{\mathbf{f}}\|_{L^1(\mathbb{R})}}$, alors on obtient l'inégalité

$$\frac{d\mathcal{H}(t)}{dt} \leq -c_6\Lambda + (1 + \frac{c_3}{c_4})\mathcal{R}(\mathbf{f}).$$

□

3.3 Réalisabilité de modèles compatibles

Sachant que notre objectif est d'utiliser le modèle (3.1) en tant qu'approximation de (3.2), il est raisonnable d'imposer certaines contraintes de compatibilités additionnelles, au-delà de celles dans la Définition 3.1.1. Nous remarquons que la preuve du résultat principal ne nécessite pas les résultats de cette section, néanmoins nous les présentons afin de traiter le problème fondamental de la non-trivialité de nos hypothèses.

On rappelle au lecteur que les probabilités de transitions p_{kl}^{ij} déterminent entièrement le MVD à l'aide des relations (2.5).

Définition 3.3.1. *On dit qu'un MVD (3.2) est une extension de (3.1) si (3.1) et (3.2) sont compatibles et si $\bar{B}_k^{ij} = B_k^{ij}$ si $i, j, k \in \{1, \dots, N\}$ mais $k \neq i, j$.*

Nous établissons, sous certaines conditions, la réalisabilité de modèles étendus compatibles grâce au lemme suivant.

Lemme 3.3.2. *Soit un modèle de collision discrète $\{p_{kl}^{ij}\}$ satisfaisant les conditions (2.5) associées aux particules ayant des vitesses v_n et des poids ν_n , $n = 1, \dots, N$. Soient*

$\{\bar{v}_{N+1}, \dots, \bar{v}_{\bar{N}}\}$ et $\bar{v}_{N+1}, \dots, \bar{v}_{\bar{N}}$ des ensembles étendus de vitesses et de particules. Pour tout choix des constantes λ^{ij} et Ω_{kl}^{ij} satisfaisant

- (i) $0 \leq \lambda^{ij} \leq 1, \quad \forall (i, j) \in D_1$
- (ii) $0 \leq \Omega_{kl}^{ij} \leq 1,$
 $\sum_{(k,l) \in D \setminus D_1} \Omega_{kl}^{ij} = 1,$
 $\Omega_{kl}^{ij} = \Omega_{kl}^{ji} = \Omega_{lk}^{ji},$
- (iii) $\Omega_{im}^{in} = 0 \quad \text{si } n \neq m$
- (iv) $\exists (i, j), (k, l) \text{ tels que } \Omega_{kl}^{ij} \neq 0, \lambda^{ij} \neq 0,$
- (v) $\Omega_{kl}^{ij} = 0 \quad \text{si (2.3) ou (2.4) ne sont pas vérifiées pour } \bar{v} \text{ et } \bar{v},$

on peut définir les paramètres \bar{p}_{kl}^{ij} selon

(a) Si $(i, j) \in D_1$

$$\bar{p}_{kl}^{ij} := \begin{cases} (1 - \lambda^{ij})p_{kl}^{ij} & \text{si } (k, l) = (i, j), \\ p_{kl}^{ij} & \text{si } (k, l) \in D \setminus \{(i, j), (j, i)\}, \\ \lambda^{ij}p_{ij}^{ij}\Omega_{kl}^{ij} & \text{si } (k, l) \in D \setminus D_1, \end{cases}$$

(b) Si $(i, j) \in D \setminus D_1$

$$\bar{p}_{kl}^{ij} := \begin{cases} (1 - \lambda^{ij})\frac{1}{2} & \text{si } (i, j) = (k, l), \\ \frac{1}{2}\lambda^{ij}\Omega_{kl}^{ij} & \text{si } \forall (k, l) \neq (i, j). \end{cases}$$

Sous ces conditions, les \bar{p}_{kl}^{ij} forment un modèle à vitesses discrètes compatible et non-trivial pour les vitesses et les masses \bar{v}_n, \bar{v}_n .

Démonstration. Pour vérifier la condition (i) de (2.5), on utilise les définitions (a) et (b)

de Lemme 3.3.2. On a

$$\begin{aligned}
\sum_{(k,l) \in D} \bar{p}_{kl}^{ij} &= \bar{p}_{ij}^{ij} + \sum_{\substack{(k,l) \in D \\ (k,l) \neq (i,j)}} \bar{p}_{kl}^{ij} + \sum_{\substack{(k,l) \notin D \\ (k,l) \neq (i,j)}} \bar{p}_{kl}^{ij} \\
&= (1 - \lambda^{ij}) p_{ij}^{ij} + \sum_{\substack{(k,l) \in D_1 \\ (k,l) \neq (i,j)}} \bar{p}_{kl}^{ij} + \lambda^{ij} p_{ij}^{ij} \left[\sum_{\substack{(k,l) \notin D_1 \\ (k,l) \neq (i,j)}} \Omega_{kl}^{ij} \right] \quad (3.52)
\end{aligned}$$

Dans le cas où $(i, j) \in D_1$, on peut utiliser la relation (a) de Lemme 3.3.2 pour simplifier (3.52)

$$\begin{aligned}
\sum_{(k,l) \in D} \bar{p}_{kl}^{ij} &= p_{ij}^{ij} - \lambda^{ij} p_{ij}^{ij} + \sum_{\substack{(k,l) \in D_1 \\ (k,l) \neq (i,j)}} \bar{p}_{kl}^{ij} + \lambda^{ij} p_{ij}^{ij} \cdot 1 \\
&= \sum_{(k,l) \in D_1} \bar{p}_{kl}^{ij} = 1.
\end{aligned}$$

Un raisonnement similaire permet de traiter le cas $(i, j) \notin D_1$.

Pour vérifier la condition (ii) de (2.5), on utilise les définitions (a) et (b) de Lemme 3.3.2. Il suffit d'observer que tous les termes λ^{ij} , Ω_{kl}^{ij} , p_{kl}^{ij} apparaissant dans la définition de \bar{p}_{kl}^{ij} permettent la permutation des indices i, j . Le paramètre \bar{p}_{kl}^{ij} est donc égal à \bar{p}_{kl}^{ji} . De même on peut vérifier que (iv)-(vi) sont satisfaits.

Quant à la condition (iii) de (2.5), on remarque que si $(i, n) \in D_1$, alors $\bar{p}_{im}^{in} = p_{im}^{in} = 0$, quand $n \neq m$, et de plus si $(i, n) \in D \setminus D_1$, $\bar{p}_{im}^{in} = \lambda^{in} \frac{1}{2} \Omega_{im}^{in} = 0$, quand $n \neq m$. \square

La construction décrite dans le Lemme 3.3.2 est particulièrement riche, au sens que les paramètres $\lambda^{ij} \in [0, 1]$ sont tout à fait arbitraires, contrairement aux coefficients Ω_{kl}^{ij} qui contrôlent l'ensemble des collisions dans le modèle étendu qui n'étaient pas considérée

dans le modèle original. Ces paramètres λ^{ij} nous permettent de construire une famille de dimension $\binom{N}{2}$ d'ensembles de modèles compatibles. La compatibilité est *continue* et *uniforme* au sens du corollaire suivant

Corollaire 3.3.3. *Si tous les $\lambda^{ij} \rightarrow 0$,*

Alors

$$\bar{p}_{kl}^{ij} \rightarrow \begin{cases} p_{kl}^{ij} & \text{si } (i, j), (k, l) \in D_1 \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

De plus, pour tout (k, l) et $(m, n) \neq (i, j)$ et $\lambda^{ij} \neq 0$,

$$\frac{\bar{p}_{kl}^{ij}}{\bar{p}_{mn}^{ij}}$$

est indépendant de λ^{ij} .

Démonstration. Ceci est une conséquence immédiate de la construction de \bar{p}_{kl}^{ij} proposée dans le Lemme 3.3.2. □

Un exemple de cette construction est donné dans le Chapitre 4.

CHAPITRE 4

RÉSULTATS NUMÉRIQUES

Nous avons construit, dans le Chapitre 3, une estimation d'erreur a posteriori pour les modèles à vitesses discrètes 1D pour l'équation de Boltzmann, et nous en avons fourni une preuve mathématique formelle en considérant deux modèles MVD compatibles : un modèle *grossier* et un modèle *fin*. L'objectif de ce chapitre est de présenter des expériences numériques effectuées sur ordinateur qui confirment la validité de l'estimateur d'erreur a posteriori proposé au Chapitre 3. Rappelons que l'estimateur d'erreur a posteriori que nous avons construit s'applique particulièrement au cas de projection 1D de modèles multi-dimensionnels. Nous choisissons d'étudier ici par des calculs sur ordinateur la projection 1D de modèles MVD coplanaires (2D) formés d'ensembles de vitesses discrètes toutes dans un même plan. Dans la Section 4.1, nous décrivons concrètement les deux modèles MVD compatibles (au sens donné au Chapitre 3) (grossier et fin) utilisés pour nos exemples. Le régime d'écoulement de gaz étudié, dans ce présent contexte d'expériences numériques, sera ensuite décrit dans la Section 4.2. Les résultats sont présentés et analysés dans la Section 4.3.

4.1 Projection de modèles MVD

Modèle grossier 2D

Le modèle grossier 2D consiste en $N = 9$ vecteurs vitesses \mathbf{u}_i ($i = 1, \dots, 9$) définis (figure 4.1-(a)) par :

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_1 &= (1, 0), & \mathbf{u}_2 &= (0, 1), & \mathbf{u}_3 &= -\mathbf{u}_1, & \mathbf{u}_4 &= -\mathbf{u}_2, & \mathbf{u}_5 &= (0, 0), \\ \mathbf{u}_6 &= (1, 1), & \mathbf{u}_7 &= (-1, 1), & \mathbf{u}_8 &= -\mathbf{u}_6, & \mathbf{u}_9 &= -\mathbf{u}_7. \end{aligned}$$

Dans ce modèle, on peut facilement identifier les trois types de collisions non-triviales suivants, de sections efficaces de collision associées $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4$:

Type 1 : (1 , 3) <-> (2 , 4)
 Type 2 : (1 , 2) <-> (5 , 6)
 Type 3 : (2 , 3) <-> (5 , 7)
 (3 , 4) <-> (5 , 8)
 (4 , 1) <-> (5 , 9)
 (6 , 3) <-> (1 , 7)
 (9 , 3) <-> (1 , 8)
 (6 , 4) <-> (2 , 9)
 (7 , 4) <-> (2 , 8)
 Type 4 : (6 , 8) <-> (7 , 9)

Dans nos applications numériques, il est tout à fait raisonnable de prendre $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = \sigma_4 = 1$ ou $1/2$. Les coefficients B_k^{ij} pour ces collisions sont facilement déduits.

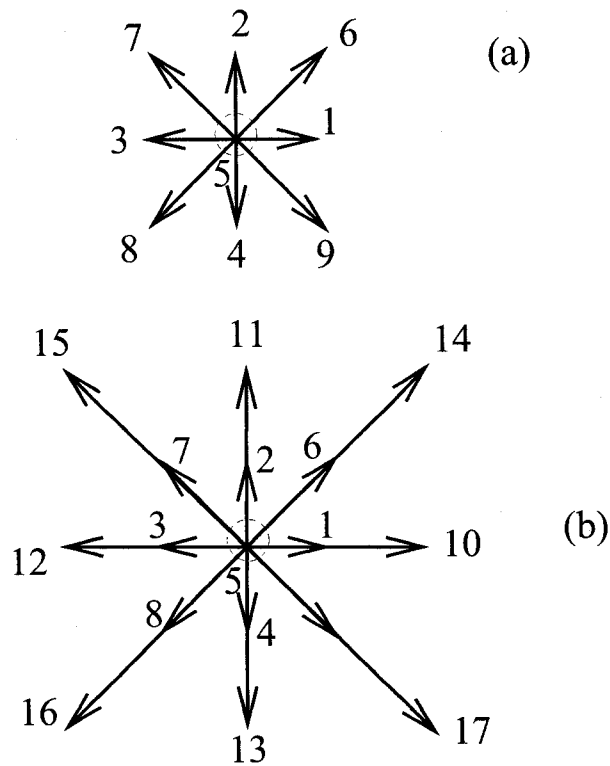


FIGURE 4.1 (a)Modèle grossier et (b)Modèle fin.

Modèle fin 2D

Le modèle MVD fin que nous considérons est constitué par l'ensemble des vecteurs vitesses $E_{17} = \{u_1 \dots u_{17}\}$ (figure 4.1-(b)). Les collisions non-triviales pour ce modèle, auxquelles il faut ajouter celles données précédemment, sont :

$$\begin{aligned}
 (6, 9) &\leftrightarrow (5, 10) \\
 (6, 7) &\leftrightarrow (5, 11) \\
 (7, 8) &\leftrightarrow (5, 12) \\
 (8, 9) &\leftrightarrow (5, 13) \\
 (10, 12) &\leftrightarrow (11, 13) \\
 (10, 11) &\leftrightarrow (5, 14)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(11, 12) &\leftrightarrow (5, 15) \\
(12, 13) &\leftrightarrow (5, 16) \\
(13, 10) &\leftrightarrow (5, 17) \\
(14, 16) &\leftrightarrow (15, 17) \\
(14, 12) &\leftrightarrow (15, 10) \\
(17, 12) &\leftrightarrow (16, 10) \\
(14, 13) &\leftrightarrow (11, 17) \\
(15, 13) &\leftrightarrow (11, 16).
\end{aligned}$$

L'écriture des équations et des coefficients \bar{B}_k^{ij} en 2D s'effectue comme dans le cas grossier.

Modèles en projection 1D

Pour les calculs numériques de validation de l'estimateur d'erreur, nous considérons les modèles MVD en une dimension obtenus par projection orthogonale Proj_D des modèles E_{17} et E_9 dans la direction $D = (1, 1)$ (figure 4.2). On notera les ensembles de vitesses $E' = \text{Proj}_D(E_9)$ et $E'' = \text{Proj}_D(E_{17})$. Ces nouveaux ensembles sont formés respectivement de 6 et 11 vitesses. Connaissant les coefficients B_k^{ij} et \bar{B}_k^{ij} pour les modèle 2D, on applique un procédé approprié de correspondance, dont le principe est schématiquement représenté par le diagramme (figure 4.2), pour construire les coefficients B_k^{ij} et \bar{B}_k^{ij} pour les modèles 1D associés. Nous ne décrivons pas ici les détails de l'implémentation de la construction des coefficients B_k^{ij} et \bar{B}_k^{ij} . Il est néanmoins important de mentionner que les coefficients \bar{B} associés à des collisions qui *pompent* les particules de l'ensemble réduit de vitesses vers l'ensemble étendu de vitesses sont pondérés par un paramètre $0 \leq \lambda \leq 1$. Le paramètre λ peut être interprété comme un coefficient de fuite. La *fuite* est réduite lorsque λ est petit. L'on retrouve ce paramètre dans la Section 3.3. Si les conditions initiales ne contiennent que des particules avec des vitesses dans E' , alors les

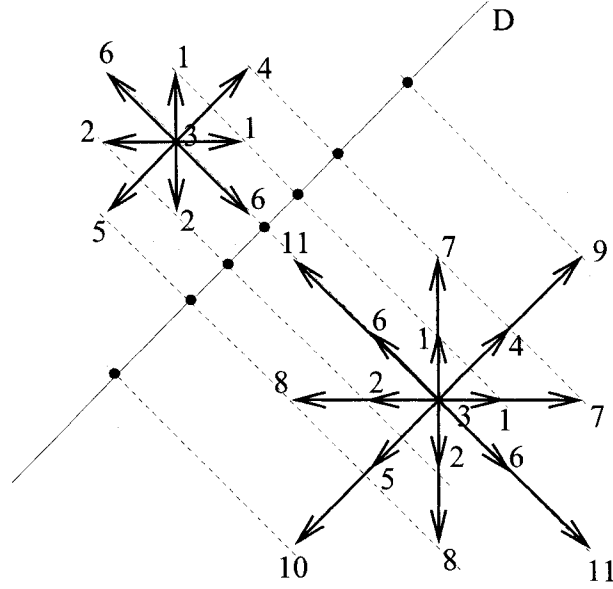


FIGURE 4.2 Projection 1D des modèles grossier et fin dans la direction $D = (1, 1)$: nomenclature de correspondance de vitesses.

coefficients B_k^{ij} avec $v_i, v_j \in E'$ et $v_k \in E''$ contrôlent le taux de production de particules avec vitesses dans E' . Comme dans la Section 3.3, nous avons décidé de rendre tous ces coefficients proportionnels à $\lambda \in [0, 1]$. La fuite des particules du modèle grossier sera alors, en partie, contrôlée par le coefficient de fuite λ .

4.2 Expériences numériques

Nous considérons le problème homogène en espace pour lequel les deux modèles MVD compatibles prennent la forme de systèmes d'équations différentielles ordinaires sui-

vants

$$\left. \begin{aligned} \frac{df_n}{dt}(t) &= Q_i(\mathbf{f}, \mathbf{f}) \\ &= \sum_{i,j=1}^N B_n^{ij} f_i(t) f_j(t), \\ f_n(0) &= f_{n,0}, \end{aligned} \right\} n = 1, \dots, 6 \quad (4.1)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\bar{f}_m}{dt}(t) &= \bar{Q}_m(\bar{\mathbf{f}}, \bar{\mathbf{f}}) \\ &= \sum_{i,j=1}^{\bar{N}} \bar{B}_m^{ij} \bar{f}_i(t) \bar{f}_j(t), \\ \bar{f}_m(0) &= \bar{f}_{m,0}, \end{aligned} \right\} m = 1, \dots, 11 \quad (4.2)$$

Nous considérerons des distributions initiales $\mathbf{f}_0 = (f_{n,0})_{n=1,\dots,6}$ et $\bar{\mathbf{f}}_0 = (\bar{f}_{m,0})_{m=1,\dots,11}$ formées par un 'mélange' de deux distributions gaussiennes

$$f_0(v) = A_0 [\exp(-v^2/2) + \exp(-(v-1)^2/2)], \quad 0 \leq A_0 \leq 1, \quad (4.3)$$

$f_{i,0} = \bar{f}_{i,0} = f_0(v_i)$ pour $i = 1, \dots, 6$ et $\bar{f}_{i,0} = 0$ pour $i > 6$. Pour ce choix de distribution initiale, la masse totale de densité initiale $\|\mathbf{f}_0\|_{L^1(\mathbb{R})} + \|\bar{\mathbf{f}}_0\|_{L^1(\mathbb{R})}$ est proportionnelle à A_0 et peut être contrôlée facilement dans notre programme de calculs. La solution numérique du problème est considérée durant un intervalle de temps $[0, t_{final}]$ avec M le nombre de pas de temps utilisé. Le temps final t_{final} est choisi assez grand pour que le système atteigne un état d'équilibre. La quantité d'intérêt (suggérée par le Corollaire 3.2.4) pour nos tests est le rapport

$$\eta := \frac{\int_0^t \|R(\mathbf{f})\|(\tau) d\tau}{\|\mathbf{f} - \bar{\mathbf{f}}\|_{L^1(\mathbb{R})}}, \quad (4.4)$$

où à chaque pas de temps t , ($0 \leq t \leq t_{final}$), la norme L_1 de la différence $\mathbf{f} - \bar{\mathbf{f}}$,

$$\|\mathbf{f} - \bar{\mathbf{f}}\|_{L^1(\mathbb{R})} = \sum_i |f_i - \bar{f}_i|(t) \quad (4.5)$$

et l'intégrale du résidu $\int_0^t \|R(\mathbf{f})\|(\tau) d\tau$, avec $\|R(\mathbf{f})\| = \sum_i |Q_i(\mathbf{f}, \mathbf{f}) - \bar{Q}_i(\mathbf{f}, \mathbf{f})|$, sont numériquement évalués sur $[0, t]$ en utilisant la méthode règle de Simpson 1/3 d'ordre 4 (Fortin, 2001). En effet, d'après le Corollaire 3.2.4 si les conditions initiales sont les mêmes, l'estimation d'erreur est donnée par

$$\|\mathbf{f}(\cdot, T) - \bar{\mathbf{f}}(\cdot, T)\|_{L^1(\mathbb{R})} \leq C' \|\mathcal{R}(\mathbf{f})\|_{L^1(\mathbb{R} \times [0, T])}.$$

En divisant par $\|\mathbf{f}(\cdot, T) - \bar{\mathbf{f}}(\cdot, T)\|_{L^1(\mathbb{R})}$, on voit que $\eta = 1/C'$. Cette quantité est appelée *indice d'efficacité* (Bangerth and Rannacher, 2003). Dans notre expérience, nous avons choisi d'intégrer les systèmes différentiels ordinaires (4.1) et (4.2) en utilisant le schéma Runge-Kutta d'ordre 4 (Fortin, 2001) avec pas de temps $\Delta t = \frac{t_{final}}{M}$.

4.3 Analyse des résultats

Les résultats des calculs numériques sont illustrés dans les Figures 4.3- 4.4. La figure 4.3 donne les graphes η en fonction du temps pour différentes valeurs de masse densité totale initiale A_0 et à valeur fixe de $\lambda = 0.125$. La figure 4.4 représente les graphes η en fonction du temps pour une valeur fixe de A_0 et différentes valeurs de $\lambda = 1.0, 0.5, 0.25, 0.125, 0.0125$. On peut remarquer que le rapport η dépend effectivement de λ et de A_0 , i.e de la masse densité totale initiale ms_0 . On peut observer que lorsque λ et A_0 sont suffisamment petits, le rapport η est pratiquement constant (autour de 1) dans le temps. Rappelons que les conditions $\lambda \ll 1$ et $ms_0 \ll 1$ sont des conditions dans l'énoncé du Théorème 3.2.3. Ces résultats (ci-dessus) confirment ainsi par le calcul sur ordinateur que lorsque $\lambda \ll 1, ms_0 \ll 1$ sont vérifiées, le rapport η est borné (pratiquement constant ou tend vers 1). L'estimateur d'erreur a posteriori proposé au chapitre 3 est valide dans le cas simple du régime de gaz homogène en espace.

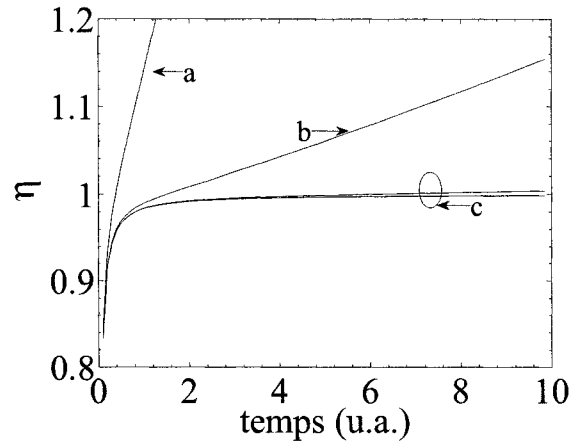


FIGURE 4.3 Graphes η en fonction du temps, pour $\lambda = 0.125$ fixe, et à différentes valeurs de masse densité totale, $A_0 =$ (a) 1.0, (b) 0.1, (c) $10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4}$.

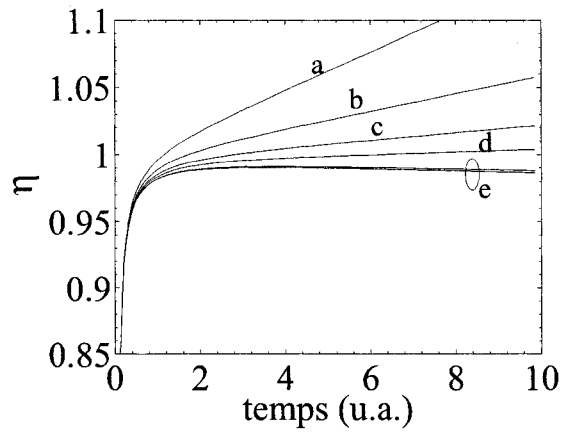


FIGURE 4.4 Graphes η en fonction du temps, pour $A_0 = 0.01$ fixe, et à différentes valeurs de $\lambda =$ (a) 1.0, (b) 0.5, (c) 0.25, (d) 0.125, (e) 0.0125, 0.00125.

CONCLUSION

De nombreux secteurs de l'ingénierie font intervenir des gaz raréfiés, tels que la rentrée atmosphérique de navettes spatiales, les micro-composantes mécaniques pour les fluides, dont la compréhension au niveau microscopique peut être modélisée par l'équation de Boltzmann. Dans certains régimes d'écoulement, l'approximation de la dynamique de gaz par les équations de la mécanique continue (Euler ou Navier-Stokes) n'est pas appropriée et il s'avère nécessaire de résoudre l'équation de Boltzmann soit analytiquement soit numériquement. Pour les modèles physiques intéressants des interactions interparticules, il s'avère quasi impossible de résoudre analytiquement l'équation de Boltzmann et alors l'analyse numérique joue ici un rôle important. Le choix de méthodes numériques efficaces et moins coûteuses en temps de calcul et espace mémoire, s'avère utile : des gains considérables peuvent être réalisés si l'on dispose d'algorithmes adaptatifs basés sur des estimateurs d'erreurs rigoureux et efficaces.

Les méthodes d'approximation numérique basée sur les modèles à vitesse discrète sont bien appropriées pour l'équation de Boltzmann. Ces modèles ont été étudiés depuis longtemps en théorie cinétique et ont été introduits dans le but de reproduire les propriétés formelles de l'équation de Boltzmann en utilisant un nombre fini de vitesses discrètes. L'objectif de ce mémoire était d'explorer une version de modèles à vitesse discrète aléatoire (MVDA) et d'en proposer une version adaptative. Le schéma MVDA est un modèle mixte déterministe-stochastique où le transfert de masse évolue de manière déterministe tandis que les vitesses post-collisionnelles sont générées de manière stochastique.

Dans ce mémoire, nous avons formellement proposé une version adaptative de l'algorithme MVDA d'Illner et Rjasanow dans le cas de modèle 1D. L'estimation d'erreur a posteriori, sous-jacente à l'adaptivité du modèle, a été rigoureusement démontré. L'ap-

proche utilisée ici offre la possibilité d'être étendue aux modèles 3D. Ce mémoire propose une preuve de borne d'erreur par extension des travaux de L^1 -stabilité de Ha et Tzavaras (Ha and Tzavaras, 2003) basé sur l'introduction d'une fonctionnelle de Lyapunov. La contribution principale est la construction rigoureuse de l'estimateur d'erreur a posteriori. Nous pensons, dans l'état actuel de nos connaissances, être les premiers à proposer un tel estimateur d'erreur, qui plus est construit rigoureusement.

Nous avons réussi à programmer en C++ l'algorithme d'Illner et Rjasanow mais n'avons pas eu le temps d'appliquer notre estimateur d'erreur pour rendre cet algorithme adaptatif. Les résultats récents de Ha (Ha, 2004) pour les modèles à vitesse discrète en n -D semblent indiquer qu'il serait possible de construire un estimateur d'erreur en 3 dimensions.

RÉFÉRENCES

- ANSUMALI, S. and KARLIN, I. V. (2002). Kinetic boundary condition for the lattice Boltzmann method. *Phys. Rev. E*, **66**, 026311.
- ANSUMALI, S., KARLIN, I. V., and ÖTTINGER, H. C. (2003). Minimal entropic kinetic models for simulating hydrodynamics. *Euro. Phys. RLet.*, **63**, 798.
- ARKERYD, L. (1972a). On the Boltzmann equation, part I : existence. *Arch. Rational Mech. Anal.*, **45**, 1–16.
- ARKERYD, L. (1972b). On the Boltzmann equation, part II : the full initial value problem. *Arch. Rational Mech. Anal.*, **45**, 17–34.
- BANGERTH, W. and RANNACHER, R. (2003). *Adaptive Finite Element Methods for Differential Equations*. Birkhäuser Verlag, Basel.
- BEALE, J.-T. (1986). Large-time behaviour of discrete velocity Boltzmann equations. *Commun. Math. Phys.*, **106**, 659–678.
- BIRD, G. A. (1970). Direct simulation of the Boltzmann equation. *Phys. of Fluids*, **13**, 2676–2681.
- BIRD, G. A. (1976). *Molecular Gas Dynamics*. Clarendon Press, Oxford.
- BIRD, G. A. (1994). *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Clarendon Press, Oxford.
- BOBYLEV, A. V. and CERCIGNANI, C. (1999). Discrete velocity models without nonphysical invariants. *J. Statist. Phys.*, **97**, 677–686.
- BOBYLEV, A. V. and RJASANOW, S. (1997). Difference scheme for the Boltzmann equation based on the Fast Fourier Transfrom. *Eur. J. Mech. B/Fluids*, **16**, 293–306.
- BOLTZMANN, L. (1872). Weitere studien uber das warmegleichgewicht unter gasmolekullen. *Sitzungsberichte der Akademie der Wissenschaften Wien*, **66**, 275–370.

- BONY, J.-M. (1987). Solutions globales bornées pour les modèles discrets de l'équation de Boltzmann, en dimension 1 d'espace. In *Journées Équations aux dérivées partielles*, number XVI, pages 1–10. École Polytechnique.
- BROADWELL, J. E. (1964). Shock structure in a simple discrete velocity gas. *Phys. Fluids*, **7**, 1243–1247.
- BUET, C. (1996). A discrete velocity scheme for the Boltzmann operator of rarefied gas dynamics. *Trans. Theo. Stat. Phys.*, **25**, 33–60.
- CABANNES, H. (1975). Etude de la propagation des ondes dans un gaz à quatorze vitesses. *J. Mécanique*, **4**, 705–744.
- CABANNES, H. (1980). The discrete Boltzmann equation : Theory and applications.
- CARLEMAN, T. (1933). Sur la théorie de l'équation integro-différentielle de Boltzmann. *Acta Mathematica*, **60**, 91–146.
- CARLEMAN, T. (1957a). *Problèmes mathématiques de la théorie cinétique des gaz*. Almqvist Wiksell, Uppsala.
- CARLEMAN, T. (1957b). *Problèmes mathématiques de la théorie cinétique des gaz*. *Publ. Scient. Inst. Mittag-Leffler*, pages 104–106.
- CERCIGNANI, C. (1988). *The Boltzmann Equation and its Applications*, volume 67 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer Verlag, New York.
- CERCIGNANI, C., RILLNER, and M. PULVIRENTI (1994). *The mathematical Theory of Dilute Gases*. Springer Verlag, New York.
- CHEN, S., DAWSON, S. P., DOOLEN, G. D., JANECKY, D. R., and LAWNICZAK, A. (1995). Lattice methods and their applications to reacting systems. *Comput. Chem. Eng.*, **19**(6/7), 617–646.
- CHEN, S. and DOOLEN, G. D. (1998). Lattice Boltzmann method for fluid flows. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, **30**, 329–364.

- DESVILLETES, L. (1993). Some applications of the method of moments for the homogeneous Boltzmann and kac equations. *Arch. Rational Mech. Anal.*, **123**, 387–404.
- D'HUMIÈRES, D., GINZBURG, I., KRAFCZYK, M., LALLEMAND, P., and LUO, L. S. (2002). Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann models in three dimensions. *Phil. Trans. R. Soc. A*, **360**, 437–451.
- DIPERNA, L. and LIONS, P. L. (1989). On the Cauchy problem for Boltzmann equations : Global existence and weak stability. *Annals of Mathematics*, **130**, 321–366.
- FORTIN, A. (2001). *Analyse numérique pour ingénieurs*. Presses internationales Polytechnique, Montréal.
- GATIGNOL, R. (1975). Théorie cinétique des gaz à répartition discrète de vitesses. volume 36 of *Lecture Notes in Physics*. Springer-Verlag, New York.
- GLASSEY, R. T. (1996). *The Cauchy problem in Kinetic theory*. SIAM, Philadelphia.
- GLIMM, J. (1965). Solutions in the large for nonlinear hyperbolic systems of equations. *Comm. Pure Appl. Math.*, **18**, 697–715.
- GODUNOV, S. K. and SULTANGHAZIN, U. M. (1971). On the discrete models of the kinetic equation of Boltzmann. *Russian Math. Surveys*, **26**, 1.
- GOLDSTEIN, D. B., STURTEVANT, B., and BROADWELL, J. E. (1989). Investigation of the motion of discrete-velocity gases. volume 118, pages 100–117.
- HA, S. Y. (2004). L^1 stability of multi-dimensional discrete-velocity Boltzmann equations. *Arch. Rational Mech. Anal.*, **171**, 25–42.
- HA, S. Y. and TZAVARAS, A. E. (2003). lyapunov functionals and L^1 -stability for discrete velocity Boltzmann equations. *Comm. Math. Phy.*, **239**, 65–92.
- HAMDACHE, K. (1992). Initial boundary value problems for Boltzmann equation. global existence of weak solutions. *Arch. Rational Mech. Anal.*, **119**, 309–353.

- HE, X. and LUO, L.-S. (1997). Theory of the lattice Boltzmann method : From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation. *Phys. Rev. E*, **56**(6), 6811–6817.
- HILL, T. L. (1986). *An introduction to statistical thermodynamics*. Dover, Mineola.
- HUANG, K. (1987). *Statistical Mechanics*. J. Wiley and Sons, New York, 2nd edition edition.
- IBRAGIMOV, I. and S.RJASANOW (2002). Numerical solution of the Boltzmann equation on the uniform grid. *Computing*, **69**, 163–186.
- ILLNER, R. and RJASANOW, S. (1992). Random discrete velocity models : possible bridges between the Boltzmann equation, discrete velocity models and particle simulation. Proc. Rapallo.
- ILLNER, R. and RJASANOW, S. (1994). Numerical solution of the Boltzmann equation by random discrete velocity models. *Eur. J. Mech.,B/Fluids*, **13**(2), 197–210.
- ILLNER, R. and WAGNER, W. (1993). A random discrete velocity model and approximation of the Boltzmann equation. *J. Statist. Phys.*, **70**(3/4), 773–792.
- INAMURO, T. and STURTEVANT, B. (1990). Numerical study of discrete velocity gases. *Phys. Fluids A*, **12**, 2196–2203.
- LATT, J. and CHOPARD, B. (2006). Lattice Boltzmann method with regularized non-equilibrium distribution functions. *Math. Comp. Sim.*, **72**, 165–168.
- LENNARD-JONES, J. E. (1931). Cohesion. *Proceedings of the Physical Society*, **43**, 461–482.
- LIU, T. P. and YANG, T. (1999). L^1 stability for 2×2 systems of hyperbolic conservation laws. *J. of AMS*, **12**(3), 729–774.
- LONG, L. N. (1991). Navier-Stokes and monte carlo results for hypersonic flows. *AIAA J.*, **29**.
- MISCHLER, S. (1997). Convergence of discrete-velocity schemes for the Boltzmann equation. *Arch. Rat. Mech. Anal.*, **140**, 53–77.

- MONACO, L. and PREZIOSI, L. (1991). *Fluid-dynamic applications of the discrete velocity models*. World Scientific, Singapore.
- NANBU, K. (1980-1981). Direct simulation scheme derived from the Boltzmann equation, I-III,IV. *J. Phys. Soc. Japan*, **49**,**50**, 2042–2058, 2829–2836.
- PALCZEWSKI, A. and SCHNEIDER, J. (1998). Existence, stability and convergence of solutions of discrete velocity models to the Boltzmann equation. *J. Statist. Phys.*, **91**, 307–326.
- PARESCHI, L. (2003). *Computational methods and fast algorithms for Boltzmann equations, Chapter 7, Lecture Notes on the discretization of the Boltzmann equation*, volume 63 of *Series on Advances in Mathematics for Applied Sciences*. World Scientific.
- PARESCHI, L. and PERTHAME, B. (1996). A Fourier spectral method for homogeneous Boltzmann equations. *transp. Theo. Stat. Phys.*, **25**, 369–383.
- PLATKOWSKI, T. and ILLNER, R. (1988). Discrete velocity models of the Boltzmann equation : a survey on the mathematical aspects of the theory. *SIAM Rev.*, **30**(2), 213–255.
- RJASANOW, S. and WAGNER, W. (1996a). Numerical study of a stochastic weighted particle method for a model kinetic equation. *J. Comp. Phys.*, **128**, 351–362.
- RJASANOW, S. and WAGNER, W. (1996b). A stochastic weighted particle method for the Boltzmann equation. *J. Comp. Phys.*, **124**, 243–253.
- RJASANOW, S. and WAGNER, W. (2001). Simulation of rare events by the stochastic weighted particle method for the Boltzmann equation. *Math. Comput. Modelling*, **33**, 907–926.
- SHAN, X. and CHEN, H. (1993). Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. *Phys. rev. E*, **47**(3), 1815–1819.
- SHAN, X. and CHEN, H. (1994). Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation. *Phys. rev. E*, **49**(4), 2941–2948.

STRANG, G. (1968). On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM J. Numer. Anal.*, **5**, 506–517.

SWIFT, M. R., OSBORN, W. R., and YEOMANS, J. M. (1995). Lattice Boltzmann simulation of nonideal fluids. *Phys. Rev. Lett.*, **75**(5), 830–833.

WENNBERG, B. (1995). Stability and exponential convergence for the Boltzmann equation. *Arch. Rational Mech. Anal.*, **130**, 103–144.

ANNEXE I

PREUVE DE LEMME

I.1 Preuve du Lemme 3.2.5

1/ *Prouvons* (3.24) :

On part des expressions

$$\begin{aligned}\bar{Q}_i(\mathbf{f}) &:= \sum_{(m,n) \in D} \bar{B}_i^{mn} f_m f_n \\ \bar{Q}_i(\bar{\mathbf{f}}) &:= \sum_{(m,n) \in D} \bar{B}_i^{mn} \bar{f}_m \bar{f}_n\end{aligned}$$

où $f_k = 0$ pour $k \in \{N+1, \dots, \bar{N}\}$. On peut alors écrire :

$$\begin{aligned}(\bar{Q}_i(\mathbf{f}) - \bar{Q}_i(\bar{\mathbf{f}}))\delta_i &= \delta_i \left[\sum_{(m,n) \in D} \bar{B}_i^{mn} f_m f_n - \sum_{(m,n) \in D} \bar{B}_i^{mn} \bar{f}_m \bar{f}_n \right] \\ &= \delta_i \left[\sum_{(m,n) \in D} \bar{B}_i^{mn} (f_m f_n - \bar{f}_m \bar{f}_n) \right].\end{aligned}\tag{I.1}$$

En utilisant la propriété (2.22), on déduit

$$\begin{aligned}\sum_{(m,n) \in D} \bar{B}_i^{mn} (f_m \bar{f}_n - \bar{f}_m f_n) \delta_i &= \delta_i \left[\sum_{(m,n) \in D} \bar{B}_i^{mn} f_m \bar{f}_n - \sum_{(m,n) \in D} \bar{B}_i^{nm} \bar{f}_m f_n \right] \\ &= \delta_i \left[\sum_{(m,n) \in D} \bar{B}_i^{mn} f_m \bar{f}_n - \sum_{(m,n) \in D} \bar{B}_i^{mn} \bar{f}_n f_m \right] \\ &= 0.\end{aligned}\tag{I.2}$$

Puisque ce terme est nul, on peut l'ajouter sans problème au second membre. En profitant de la définition

$$\delta_m = \text{sgn}(f_m - \bar{f}_m), \quad (I.3)$$

on peut réécrire l'égalité

$$\begin{aligned} (\bar{Q}_i(\mathbf{f}) - \bar{Q}_i(\bar{\mathbf{f}}))\delta_i &= \sum_{(m,n) \in D} \bar{B}_i^{mn} (f_m f_n - \bar{f}_m f_n + f_m \bar{f}_n - \bar{f}_m \bar{f}_n) \delta_i \\ &= \sum_{(m,n) \in D} \bar{B}_i^{mn} (f_m - \bar{f}_m)(f_n - \bar{f}_n) \delta_i \\ &= \sum_{(m,n) \in D} \bar{B}_i^{mn} \frac{\delta_i}{\delta_m} |f_m - \bar{f}_m| (f_n + \bar{f}_n) \\ &= \sum_{(m,n) \in D^*} \bar{B}_i^{mn} \frac{\delta_i}{\delta_m} |f_m - \bar{f}_m| (f_n + \bar{f}_n) \\ &\quad + \sum_{n=1}^{\bar{N}} \bar{B}_i^{nn} \frac{\delta_i}{\delta_n} |f_n - \bar{f}_n| (f_n + \bar{f}_n) \end{aligned}$$

2/ *Prouvons* (3.25) :

A partir de la propriété de conservation de masse (2.28), où on prend $(i, j) = (n, n)$, on en déduit

$$\bar{\nu}_n \bar{B}_n^{nn} = - \sum_{i=1, i \neq n}^{\bar{N}} \bar{\nu}_i \bar{B}_i^{nn}. \quad (I.4)$$

Notre objectif c'est de simplifier la somme sur i du deuxième terme dans (3.24). Nous appliquerons l'identité précédente à ce terme de la manière suivante :

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^{\bar{N}} \sum_{n=1}^{\bar{N}} \bar{\nu}_i \bar{B}_i^{nn} \frac{\delta_i}{\delta_n} |f_n - \bar{f}_n| (f_n + \bar{f}_n) \\
&= \sum_{(i,n) \in D^*} \bar{\nu}_i \bar{B}_i^{nn} \frac{\delta_i}{\delta_n} |f_n - \bar{f}_n| (f_n + \bar{f}_n) \\
&\quad + \sum_{n=1}^{\bar{N}} \bar{\nu}_n \bar{B}_n^{nn} \frac{\delta_n}{\delta_n} |f_n - \bar{f}_n| (f_n + \bar{f}_n) \\
&= \sum_{(i,n) \in D^*} \bar{\nu}_i \bar{B}_i^{nn} \frac{\delta_i}{\delta_n} |f_n - \bar{f}_n| (f_n + \bar{f}_n) \\
&\quad - \sum_{n=1}^{\bar{N}} \sum_{i=1, i \neq n}^{\bar{N}} \bar{\nu}_i \bar{B}_i^{nn} |f_n - \bar{f}_n| (f_n + \bar{f}_n) \\
&= \sum_{(i,n) \in D^*} \bar{\nu}_i \bar{B}_i^{nn} \left(\frac{\delta_i}{\delta_n} - 1 \right) |f_n - \bar{f}_n| (f_n + \bar{f}_n) \leq 0, \tag{I.5}
\end{aligned}$$

car $\bar{\nu}_i \geq 0$, $\bar{B}_i^{nn} \geq 0$, $|f_n - \bar{f}_n| \geq 0$, $(f_n + \bar{f}_n) \geq 0$, et $\delta_i = \pm 1$ ou 0 (ce qui implique $\frac{\delta_i}{\delta_n} - 1 \leq 0$) pour tout i, n .

3/ *Prouvons (3.26)* :

Cette preuve est semblable à celle que nous venons de présenter pour l'identité (3.25).

On part du terme de gauche dans (3.26) pour déduire

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^{\bar{N}} (\bar{\nu}_i - \bar{\nu}_j) \bar{\nu}_i \bar{\nu}_j \sum_{n=1}^{\bar{N}} \bar{B}_i^{nn} \frac{\delta_i}{\delta_n} |f_n - \bar{f}_n| (f_n + \bar{f}_n) \\
&= \sum_{i=1}^{\bar{N}} \left[\bar{\nu}_i \bar{\nu}_i \sum_{n=1}^{\bar{N}} \bar{B}_i^{nn} \frac{\delta_i}{\delta_n} |f_n - \bar{f}_n| (f_n + \bar{f}_n) - \bar{\nu}_j \bar{\nu}_i \bar{\nu}_j \sum_{n=1}^{\bar{N}} \bar{B}_i^{nn} \frac{\delta_i}{\delta_n} |f_n - \bar{f}_n| (f_n + \bar{f}_n) \right] \\
&= \sum_{i=1}^{\bar{N}} \left[\bar{\nu}_j \underbrace{\bar{\nu}_n \bar{B}_n^{nn}}_{(a)} \frac{\delta_n}{\delta_n} |f_n - \bar{f}_n| (f_n + \bar{f}_n) + \sum_{n=1, n \neq i}^{\bar{N}} \bar{\nu}_j \bar{\nu}_i \bar{\nu}_j \bar{B}_i^{nn} \frac{\delta_i}{\delta_n} |f_n - \bar{f}_n| (f_n + \bar{f}_n) \right. \\
&\quad \left. + \bar{\nu}_j \bar{\nu}_j \underbrace{\bar{\nu}_n \bar{B}_n^{nn}}_{(b)} \frac{\delta_n}{\delta_n} |f_n - \bar{f}_n| (f_n + \bar{f}_n) + \sum_{n=1, n \neq i}^{\bar{N}} -\bar{\nu}_j \bar{\nu}_j \bar{\nu}_i \bar{B}_i^{nn} \frac{\delta_i}{\delta_n} |f_n - \bar{f}_n| (f_n + \bar{f}_n) \right] \tag{I.6}
\end{aligned}$$

On traitera (a) et (b) en utilisant les propriétés de conservation de masse et de quantité de mouvement. On rappelle au lecteur l'identité (I.4)

$$\bar{\nu}_n \bar{B}_n^{nn} = - \sum_{i=1, i \neq n}^{\bar{N}} \bar{\nu}_i \bar{B}_i^{nn},$$

et à partir de (2.28) en posant $(i, j) = (n, n)$, on peut aussi déduire

$$\bar{\nu}_n \bar{\nu}_n \bar{B}_n^{nn} = - \sum_{i \neq n, i=1}^{\bar{N}} \bar{\nu}_i \bar{\nu}_i \bar{B}_i^{nn}. \quad (\text{I.7})$$

Notre intention est de remplacer (a) et (b) par les expressions dans (I.4) et (I.7) :

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^{\bar{N}} (\bar{\nu}_i - \bar{\nu}_j) \bar{\nu}_i \bar{\nu}_j \sum_{n=1}^{\bar{N}} \bar{B}_i^{nn} \frac{\delta_i}{\delta_n} |f_n - \bar{f}_n| (f_n + \bar{f}_n) \\ &= \sum_{i=1}^{\bar{N}} \left\{ \sum_{n=1, n \neq i}^{\bar{N}} \left[\bar{\nu}_j \bar{\nu}_i \bar{B}_i^{nn} \frac{\delta_i}{\delta_n} |f_n - \bar{f}_n| (f_n + \bar{f}_n) - \bar{\nu}_j \sum_{n=1, n \neq i}^{\bar{N}} \bar{\nu}_j \bar{\nu}_i \bar{B}_i^{nn} |f_n - \bar{f}_n| (f_n + \bar{f}_n) \right] \right. \\ & \quad \left. + \sum_{n=1, n \neq i}^{\bar{N}} \left[-\bar{\nu}_j \bar{\nu}_j \bar{\nu}_i \bar{B}_i^{nn} \frac{\delta_i}{\delta_n} |f_n - \bar{f}_n| (f_n + \bar{f}_n) + \bar{\nu}_j \bar{\nu}_j \sum_{n=1, n \neq i}^{\bar{N}} \bar{\nu}_i \bar{B}_i^{nn} |f_n - \bar{f}_n| (f_n + \bar{f}_n) \right] \right\} \\ &= \sum_{i=1}^{\bar{N}} \left\{ \sum_{n=1, n \neq i}^{\bar{N}} \bar{\nu}_j \bar{\nu}_i \bar{B}_i^{nn} \left(\frac{\delta_i}{\delta_n} - 1 \right) |f_n - \bar{f}_n| (f_n + \bar{f}_n) \right. \\ & \quad \left. + \sum_{n=1, n \neq i}^{\bar{N}} -\bar{\nu}_j \bar{\nu}_j \bar{\nu}_i \bar{B}_i^{nn} \left(\frac{\delta_i}{\delta_n} - 1 \right) |f_n - \bar{f}_n| (f_n + \bar{f}_n) \right\} \\ &= \sum_{(i,n) \in D^*} (\bar{\nu}_i - \bar{\nu}_j) \bar{\nu}_j \bar{\nu}_i \bar{B}_i^{nn} \left(\frac{\delta_i}{\delta_n} - 1 \right) |f_n - \bar{f}_n| (f_n + \bar{f}_n) \end{aligned}$$